



Couplages multi-physiques : évaluation des impacts méthodologiques lors de simulations de couplages neutronique/thermique/mécanique.

Cyril Patricot

► To cite this version:

Cyril Patricot. Couplages multi-physiques : évaluation des impacts méthodologiques lors de simulations de couplages neutronique/thermique/mécanique.. Analyse numérique [math.NA]. Université Paris Saclay (COMUE), 2016. Français. NNT : 2016SACLX007 . tel-01355622

HAL Id: tel-01355622

<https://pastel.archives-ouvertes.fr/tel-01355622>

Submitted on 23 Aug 2016

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

NNT : 2016SACLX007

THESE DE DOCTORAT
DE
L'UNIVERSITE PARIS-SACLAY
PREPAREE A
L'ECOLE POLYTECHNIQUE

ECOLE DOCTORALE N° 573

Interfaces : approches interdisciplinaires / fondements, applications et innovation

Spécialité de doctorat : Mathématiques Appliquées

Par

M. Cyril Patricot

Couplages multiphysiques : évaluation des impacts méthodologiques lors de
simulations de couplages neutronique / thermique / mécanique

Thèse présentée et soutenue à Saclay, le 22 mars 2016 :

Composition du Jury :

M. Desprès Bruno	Professeur, Université Pierre et Marie Curie	Président du jury
M. Ragusa Jean	Associate Professor, Texas A&M University	Rapporteur
M. Rubiolo Pablo	Professeur, Institut polytechnique de Grenoble	Rapporteur
M. Blaise Patrick	Directeur de recherche, CEA Cadarache	Examineur
M. Guérin Pierre	Ingénieur-Chercheur, EDF R&D	Examineur
M. Le Pallec Jean-Charles	Ingénieur-Chercheur, CEA Saclay	Examineur
M. Allaire Grégoire	Professeur, Ecole Polytechnique	Directeur de thèse

Remerciements

Parce qu'une thèse n'est pas un travail solitaire, je tiens à remercier chaleureusement ici toutes les personnes qui m'ont aidé et soutenu pendant ces trois années.

Tout d'abord, un grand merci à l'équipe d'encadrement à l'existence officielle :

Grégoire Allaire, mon directeur de thèse, qui m'a suivi et soutenu tout au long de la thèse. Merci pour tes conseils, ta sagacité et ta patience pour mes obscurs travaux d'élevage de batraciens (TETAR tout ça...).

Edouard Hourcade, mon encadrant de première moitié de thèse. Merci pour ton enthousiasme communicatif, tes idées nombreuses (et parfois pas aussi farfelues qu'elles en donnent l'air!), et pour m'avoir proposé un sujet de thèse aussi intéressant.

Jean-Charles Le Pallec, mon encadrant de seconde moitié de thèse. Merci d'avoir repris le flambeau hourcadien et d'avoir éclairé ma route les jours sombres de la thèse.

Un grand merci également à l'équipe d'encadrement officieuse qui s'est formée progressivement autour de la thèse :

Guillaume Campioni, collègue coupleur, physicien des réacteurs et co-dernier des mouches du sodium au SERMA. Merci pour ton esprit critique, ta relecture très attentive du présent manuscrit et ton esprit réactionnaire rafraichissant.

Olivier Fandeur, spécialiste de CAST3M. Ton aide et tes conseils ont été indispensables à la réalisation de ce travail de thèse. Merci également pour ton indulgence envers les neutroniciens qui nomment « flux » leur variable primale, ces barbares.

Anne-Marie Baudron, un peu ma référente « APOLLO3® profond » et méthode numérique en neutronique. Merci de m'avoir laissé recoder CRONOS dans CAST3M.

Daniel Broc, l'expert en interaction fluide-structure du groupe. Ce fut un plaisir de travailler et de débattre avec toi ! Ton positionnement entre la numérique et la physique m'inspire beaucoup.

Karim Ammar, collègue thésard devenu grand, référent « API APOLLO3® », physicien des réacteurs. Malgré que tu aies trahi de la cause sodium, tu restes quelqu'un de bien.

Antoine Gerschenfeld, thermohydraulicien du sodium. Grâce à tes conseils j'ai arrêté la thermohydraulique, merci ! Merci également d'avoir régulièrement écouté mes problèmes dans le bus, et de ne pas y avoir ronflé trop fort.

Frédéric Damian, physicien des réacteurs qui, non content d'être mon chef de laboratoire, a également tenu à suivre de près mon travail de thèse !

Je tiens également à remercier les stagiaires avec qui j'ai eu l'occasion de travailler :

Grzegorz Kepisty tout particulièrement, un peu mon utilisateur préféré, qui, après avoir réalisé un premier stage avec TETAR lorsque j'étais en première année, est revenu pour utiliser mes développements dans CAST3M à la fin de ma thèse. Merci de m'avoir laissé croire que mes outils sont faciles à utiliser par d'autres !

Romain Bontemps, **Antonin Dussaix** et **Gregory Delipei** dont les stages ont été très instructifs sur les techniques de couplage.

Je n'oublie pas la hiérarchie du CEA qui m'a accueilli pour la thèse, et continuera de m'accueillir pour la suite. Merci donc à **Patrick Blanc-Tranchant**, chef de service, **Alain Aggery** chef de laboratoire à mon arrivée et **Frédéric Damian** actuel chef de laboratoire.

Je remercie chaleureusement mes deux rapporteurs, **Jean Ragusa** et **Pablo Rubiolo**, pour leur lecture attentive du mémoire et leurs remarques. Merci également aux autres membres de mon jury, **Patrick Blaise**, **Bruno Després** et **Pierre Guérin**, pour avoir accepté d'examiner mon travail.

Merci aux membres de mon laboratoire, et plus généralement du service, pour la bonne humeur ambiante et les viennoiseries le matin. Ce fut un plaisir de travailler dans cet environnement !

Merci aux camarades stagiaires et thésards que j'ai côtoyés pendant ces trois ans. En particulier, merci à ceux qui n'avaient pas anticiper la rédaction de leur manuscrit pour m'avoir montré ce qu'il en coûtait !

Merci aux membres du Groupe de Travail ébullition stabilisée (**Nicolas Alpy**, **Guillaume Campioni**, **Antoine Gerschenfeld**, **Yannick Gorse**, **Simon Li**, **Marine Anderhuber**, **Laura Matteo** etc.) pour avoir supporté mes radotages sur le quasi-statique.

Merci à mes amis de m'apprendre régulièrement l'humilité à l'escalade ou aux jeux de société.

Enfin, j'aimerais faire des remerciements particuliers à mes parents pour leur soutien tout au long de mes études, voire, on peut le dire, de ma vie.

Résumé

Les cœurs de réacteurs nucléaires sont susceptibles de se déformer par dilatations thermiques, effets d'irradiation des matériaux ou lors d'accidents particuliers comme des séismes. Ces déformations mécaniques ont un impact sur la réaction en chaîne nucléaire, relevant de la neutronique. Les réacteurs à neutrons rapides sont particulièrement sensibles à ces effets, du fait de leurs propriétés neutroniques (fuites importantes, faible fraction de neutrons retardés, forte irradiation des matériaux) et thermiques (forts gradients thermiques, fortes variations possibles des températures lors d'accidents). Ceci explique que, dans le cadre du développement des réacteurs de quatrième génération, il y ait un regain d'intérêt pour l'étude de l'impact des déformations mécaniques sur la neutronique.

Dans le même temps, le domaine de la simulation multiphysique est en pleine évolution. L'augmentation des capacités de calcul, la volonté d'améliorer les modélisations et de se soustraire des conservatismes de découplage, ainsi que la complexification des objets technologiques étudiés accroissent l'intérêt pour les simulations multiphysiques. Cependant, l'approche classique, qui consiste à faire communiquer des simulations distinctes, peut introduire des limitations de stabilité, de précision et de robustesse plus fortes que celles des composants.

L'objectif de cette thèse est l'étude des méthodes de couplage entre neutronique, thermique et mécanique. Après une revue générale des techniques de couplage, on s'est intéressé à la prise en compte de déformations mécaniques dans les simulations neutroniques. Les codes actuels de neutronique utilisant des méthodes déterministes ne sont généralement pas capables de traiter une géométrie déformée. Ce type de calcul a pourtant un intérêt fort pour la filière rapide et est un prérequis indispensable pour l'étude du couplage envisagée. Deux approches ont été identifiées et implémentées pour répondre à cette problématique, selon que l'on utilise un maillage de calcul mobile ou fixe. Elles ont été testées et confrontées sur les essais de gerbage du réacteur Phénix. Le couplage a été étudié ensuite, avec l'approche à maillage mobile, sur l'expérience Godiva qui présente un couplage à la fois conceptuellement simple et fort entre les physiques qui nous intéressent. Ces travaux ont permis de mettre en avant l'utilisation de la méthode de factorisation quasi-statique en neutronique qui permet de coupler efficacement un solveur de neutronique cinétique avec une autre discipline. Travail plus amont, le développement d'un solveur directement multiphysique a également été exploré. L'utilisation de l'algorithme de Newton sur les formes discrétisées des équations couplées a donné de bons résultats et semble être une approche généralisable à d'autres couplages.

Cette thèse débouche ainsi à la fois sur une meilleure compréhension de la physique des

cœurs déformés et sur des outils opérationnels pour leur simulation, mais aussi sur des recommandations très générales pour la mise en œuvre de calculs couplés.

Abstract

Nuclear reactor cores can be deformed by thermal expansion, irradiation effects or during particular accidental transients. These deformations are likely to impact neutron transport. Fast neutron reactors are particularly sensitive to these effects, because of their thermal features (large temperature gradients, potentially strong temperature variations in case of accident) and the way neutrons evolve within the core (important role played by leakages in the neutron balance, weak fraction of delayed neutrons). As a consequence, in the context of the development of the fourth generation, the need for tools able to assess the neutron behavior within deformed cores is growing.

In parallel, multiphysics simulation is an expanding field. The increase of computer performances, the desire to improve modelling and to avoid conservatisms due to decoupling approximations, together with the growing complexity of the studied objects, increase the need for multiphysics simulations. However, the classic approach, which consists in iterating distinct computations, can lead to stability, accuracy and reliability issues stronger than those of the individual components.

The objective of this thesis is to study coupling techniques between neutron transport, heat transfer and mechanics. First, a very general review of coupling techniques in the literature was done. Then we worked on neutron transport simulations in wrapped cores. Most of current deterministic codes for neutron transport are not able to deal with deformed geometry. This kind of computations is however of special interest for fast neutrons reactors and is a prerequisite for our planned coupling study. Two approaches were identified and implemented to take into account core deformations, using respectively mobile and fixed meshing. They were tested and compared on the flowering tests of the reactor Phenix. The coupling itself was studied afterwards, on the Godiva experiment. It was chosen because of the direct, strong and time-dependent coupling it involves. On this case, the “quasi-static” factorization of neutron flux was shown to be an effective way to couple a space- and time-dependent neutron transport solver with another discipline. We also investigated the development of a unique multiphysics solver. The well-known Newton algorithm applied to the discretized forms of the coupled equations was shown to be an efficient tool, which could be generalized to other couplings.

This thesis therefore leads, on the one hand, to a better understanding of the physics of deformed cores and to operational tools to simulate these effects, and on the other hand, to very general advices for multiphysics calculations.

Glossaire

ABN *Approximate Block Newton*. 38, 41, 44, 55

ABN-J *Approximate Block Newton-Jacobi*. 39, 41, 44

ASPIN *nonlinear Additive Schwarz Preconditioned Inexact Newton*. 41, 44, 55

ASTRID *Advanced Sodium Technological Reactor for Industrial Demonstration*. 5

AURN Arrêts d’Urgence par Réactivité Négative. 5, 6, 71, 86, 204, 213

BiCGStab *BiConjugate Gradient Stabilized method*. 35

CEA Commissariat à l’Energie Atomique et aux énergies alternatives. 5, 17, 68, 201

CFL Courant-Friedrichs–Lewy. 52

FFTF *Fast Flux Test Facility*. 67

GMRES *Generalized Minimal RESidual method*. 31, 35, 37

GRK *Generalized Runge-Kutta*. 157

IQM *Improved Quasi-static Method*. 156, 157, 169–172, 174, 175, 177, 197, 202

JFNK *Jacobian-Free Newton-Krylov*. 31, 35–38, 41, 52, 54, 55, 201

OSSI *Operator Split Semi-Implicit*. 52

PCQM *Predictor-Corrector Quasi-static Method*. 156, 157, 169–172, 197, 202

PMC Plan Médian Coeur. 86

PSI *Paul Scherrer Institut*. 67, 141, 143, 144, 168

REL Réacteurs à Eau Légère. 4

REP Réacteur à Eau Pressurisé. 68, 92, 153, 161, 204

RNR Réacteurs à Neutrons Rapides. 5, 66, 68, 75, 92, 201

RNR-Na Réacteur à Neutrons Rapides à caloporteur sodium. 5, 7, 67, 68, 147, 153, 161, 202, 203

SEMT Service d’Etudes Mécaniques et Thermiques. 6, 101, 205

SERMA Service d’Etudes des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées. 6, 101, 205

SPN *Simplified PN*. 8, 11, 145–152, 154, 180, 186, 197, 204

STMF Service de Thermohydraulique et de Mécanique des Fluides. 205

V and V Vérification et Validation. 206

Table des matières

Remerciements	i
Résumé	iii
Abstract	v
Glossaire	viii
 Introduction générale	 1
Chapitre 1 Introduction générale	3
1.1 Enjeux	3
1.2 Orientation donnée au travail de thèse	6
1.3 Organisation de la thèse	7
1.4 Introduction à la neutronique	8
 I Techniques de couplage usuelles	 13
Chapitre 2 Introduction de la première partie	17
2.1 Vocabulaire	17
Chapitre 3 Les techniques de couplage en stationnaire	19
3.1 Rappel de la problématique	19
3.2 Méthode de Gauss-Seidel	20
3.3 Méthode de Newton	28
3.4 Méthode JFNK (Jacobian-Free Newton-Krylov)	31
3.5 Méthode JFNK préconditionnée	36
3.6 Méthode ABN (Approximate Block Newton)	38
3.7 Méthode ASPIN (nonlinear Additive Schwarz Preconditioned Inexact Newton)	41
3.8 Méthodes de prédicteur-correcteur	45
Chapitre 4 Les techniques de couplage en transitoire	47
4.1 Méthodes directement issues des techniques stationnaires	47
4.2 Amélioration de la précision du couplage explicite	50
4.3 Contrôle du pas de temps	52
Chapitre 5 Conclusion de la première partie	53
5.1 Aperçu de la problématique spatiale du couplage	53

5.2	Quelques exemples de couplages intriqués	54
5.3	Synthèse	55
II	Prise en compte de déformations mécaniques en neutronique	57
Chapitre 6	Introduction de la deuxième partie	61
6.1	Objectifs	61
6.2	Données utilisées	62
6.3	Méthodes existantes dans la littérature	62
6.4	Présentation de Phénix et des essais de gerbage	69
Chapitre 7	Déformation de géométrie à maillage fixe avec APOLLO3®	75
7.1	Déplacement de la matière	75
7.2	Déplacement des précurseurs de neutrons retardés	88
7.3	Application aux essais de gerbage de Phénix	92
Chapitre 8	Déformation de géométrie à maillage mobile avec CAST3M	101
8.1	Quelques rappels sur la méthode des éléments finis	102
8.2	Implémentation d'un solveur de diffusion neutronique stationnaire dans CAST3M	105
8.3	Implémentation d'un solveur de diffusion neutronique cinétique dans CAST3M	116
8.4	Application à une géométrie déformée : les essais de gerbage de Phénix	129
Chapitre 9	Conclusion de la deuxième partie	135
III	Etude de techniques de couplage sur l'expérience Godiva	137
Chapitre 10	Introduction de la troisième partie	141
10.1	Présentation de l'expérience Godiva	141
10.2	Résultats obtenus à PSI	143
Chapitre 11	Calculs monophysiques	145
11.1	Neutronique : transport PN simplifié et simulé en cinétique	145
11.2	Neutronique : la factorisation quasi-statique	153
11.3	Thermique	161
11.4	Mécanique	162
Chapitre 12	Calculs couplés	165
12.1	Etablissement d'une référence	165
12.2	Travail sur les méthodes de couplage	172
Chapitre 13	En guise de perspective : réalisation d'un couplage intriqué	179
13.1	Etablissement des équations	179
13.2	Expérience numérique	188
13.3	Conclusion	194
Chapitre 14	Conclusion de la troisième partie	197

Conclusion générale	199
Chapitre 15 Conclusion générale	201
15.1 Bilan	201
15.2 Les principaux apports de la thèse	202
15.3 Perspectives	204
15.4 Discussion sur le couplage	205
Annexe A Modélisation de la déformation de géométrie dans TRIPOLI-4	209
Annexe B Comparaison entre codes d'effets en réactivité de déformations	213
Annexe C Etablissement des équations SPN	217
Annexe D Cas de la géométrie sphérique	233
Bibliographie	237

Introduction générale

Introduction générale

1.1 Enjeux

Le compartimentage des métiers et des disciplines physiques, associé à la faiblesse des moyens informatiques, a mené, lorsque le calcul numérique est apparu, à la création d'outils de simulation spécialisés. Cependant, les phénomènes étudiés mêlent souvent plusieurs disciplines, et la nécessité de faire des simulations multiphysiques est ainsi apparue très tôt. On parle alors de couplage. Il y a deux réponses traditionnelles à ce besoin. La première consiste à incorporer dans un code spécialisé des modèles simplifiés (qui peuvent être alimentés par des calculs de référence) des autres disciplines physiques. La seconde est l'exécution séquentielle de plusieurs codes échangeant des informations. Ces deux approches ont pour point commun la mise en œuvre de leviers de pénalisation permettant de garantir le conservatisme de la réponse physique obtenue par la modélisation.

L'augmentation des capacités de calcul, la volonté d'améliorer les modélisations et de se soustraire des conservatismes de découplage, le tout associé à la complexification des objets technologiques étudiés accroissent l'intérêt pour les simulations multiphysiques. Ces objectifs sont récurrents, mais il n'est pas du tout certain qu'ils soient atteints si l'attention n'est pas portée sur la façon dont le couplage est réalisé. Faire communiquer des simulations distinctes peut introduire des limitations de stabilité, de précision et de robustesse plus fortes que celles des composants. En outre, l'échange des informations peut se révéler lui-même plus coûteux que l'exécution des codes couplés.

Ces enjeux ont conduit la communauté scientifique à mettre au point des techniques de couplage efficaces et robustes. Cette thèse s'inscrit dans cette dynamique. Les phénomènes étudiés en physique des réacteurs sont par nature multiphysiques, mais pour autant leur modélisation reste découpée en disciplines distinctes. Le physique du cœur du réacteur, là où la réaction en chaîne a lieu, est régie en premier lieu par le trio neutronique (description du comportement des neutrons), thermohydraulique (description de l'écoulement qui extrait la chaleur) et physique du combustible (description de l'évolution du combustible sous irradiation et chauffage thermique). La thermohydraulique elle-même est souvent décrite par des codes distincts, dédiés aux différents composants des circuits de refroidissement, et couplés entre eux. Notre propos se concentrant sur le cœur, nous englobons par la suite la description de tous les écoulements en dehors du cœur sous l'appellation thermohydraulique système. L'évolution des

températures du cœur provoque par ailleurs des déformations par dilatations thermiques des structures le constituant, dont la prise en compte passe par la thermomécanique des structures (généralement incluse dans les codes de neutronique ou de thermohydraulique). Enfin, dans certaines situations accidentelles (séisme par exemple), il est nécessaire de prendre en compte des effets de déformations purement mécaniques du cœur, susceptibles d'impacter la neutronique. Lorsqu'elles sont rapides, ces déformations doivent être calculées en prenant en compte la présence du fluide, couplage suffisamment étudié par ailleurs pour avoir donné naissance à une discipline à part entière, l'interaction fluide-structure. Les relations entre ces différentes disciplines sont illustrées figure 1.1.

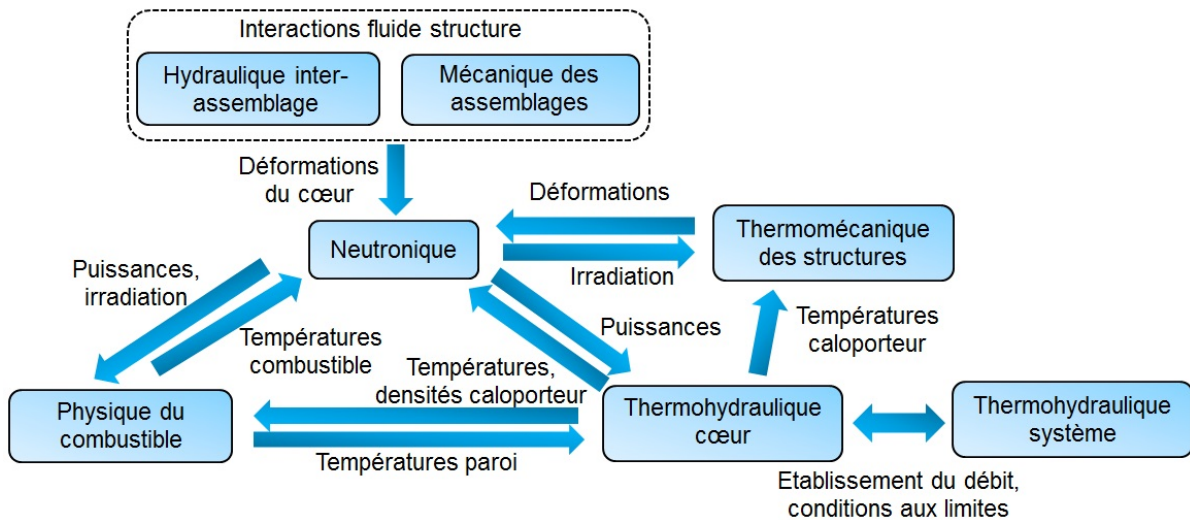


FIGURE 1.1 – Disciplines classiquement mises en jeu en physique des réacteurs et leurs interactions principales.

Il est visible sur la figure 1.1 que les disciplines s'influencent souvent mutuellement. C'est la caractéristique d'un véritable couplage, par opposition à la situation où seule une discipline influence l'autre, ce que l'on appelle chaînage.

Depuis l'apparition du couplage comme thématique de recherche, de très nombreux travaux (on peut citer par exemple deux projets internationaux, NURESAFE [79] en Europe et CASL [25] aux Etats-Unis, qui portent sur les couplages neutronique-thermohydraulique-physique du combustible en Réacteurs à Eau Légère (REL)), ont eu lieu entre neutronique et thermohydraulique (souvent associée à des modèles simples de thermomécanique pour le combustible et les structures), et bien sûr, entre thermohydraulique cœur et thermohydraulique système. La tendance est à l'incorporation de la physique du combustible dans cette démarche. Cette thématique a donné lieu à une contribution à une conférence [86], mais ne sera pas reprise dans le présent document.

Cette thèse porte quant à elle sur les techniques de couplage entre neutronique, thermique et mécanique. L'impact direct de la neutronique sur la mécanique (gonflement et fluage sous irradiation, par exemple) est trop lent pour mener à des couplages forts. Les déformations thermomécaniques sont quant à elles assujetties au couplage neutronique-thermohydraulique qui, étant plus fort, masque le couplage qui nous intéresse. Enfin, comme on peut le voir figure 1.1, il n'y a classiquement pas de retour de la neutronique vers la mécanique rapide, régie par

l'interaction fluide structure, dans un réacteur nucléaire. Ces constats expliquent le parti pris de consacrer une part substantielle du travail de thèse au chaînage mécanique-neutronique (en laissant la thermique de côté dans un premier temps), ce qui est déjà en soi une thématique de recherche actuelle et importante pour la compréhension de la physique des réacteurs. Le couplage a été étudié ensuite, en introduisant la thermique comme support du retour de la neutronique vers la mécanique, et sur un système, autre qu'un réacteur nucléaire, qui permet de décrire un couplage fort entre ces disciplines. Des enseignements généraux, pouvant s'appliquer à d'autres couplages, ont été tirés de ce travail.

Pourquoi s'intéresser aux interactions entre neutronique et mécanique ?

Comme nous l'avons déjà évoqué, les cœurs des réacteurs nucléaires sont susceptibles de se déformer par dilatations thermiques, effets d'irradiation des matériaux ou lors d'accidents particuliers comme des séismes. Ces effets, difficiles à calculer avec précision et mineurs dans les réacteurs à eau (qui constituent la grande majorité de la flotte de réacteurs déployée dans le monde) sont historiquement maîtrisés par des conservatismes. Les Réacteurs à Neutrons Rapides (RNR) sont en revanche beaucoup plus sensibles à ces effets, du fait de leurs propriétés neutroniques (fuites neutroniques importantes, faible fraction de neutrons retardés, forte irradiation des matériaux) et thermiques (fortes variations possibles des températures lors d'accidents). Ceci explique que, dans le cadre du développement des réacteurs de quatrième génération (on peut citer comme exemple le projet *Advanced Sodium Technological Reactor for Industrial Demonstration* (ASTRID), prototype industriel de Réacteur à Neutrons Rapides à caloporteur sodium (RNR-Na), en cours de conception par le Commissariat à l'Energie Atomique et aux énergies alternatives (CEA), et qui devrait être construit dans les années 2020 en France), il y ait un regain d'intérêt pour l'étude de l'impact des déformations mécaniques sur la neutronique (voir section 6.3 pour un état de l'art du sujet).

Une motivation supplémentaire à l'étude du chaînage mécanique-neutronique est la compréhension des Arrêts d'Urgence par Réactivité Négative (AURN), du RNR-Na expérimental Phénix, qui pourraient avoir été causés par un réarrangement des assemblages [47]. La figure 1.2 montre l'évolution du signal neutronique mesuré pendant un de ces AURN, exprimé en puissance. La compréhension de ces transitoires est un enjeu pour le développement de la filière RNR-Na en France.

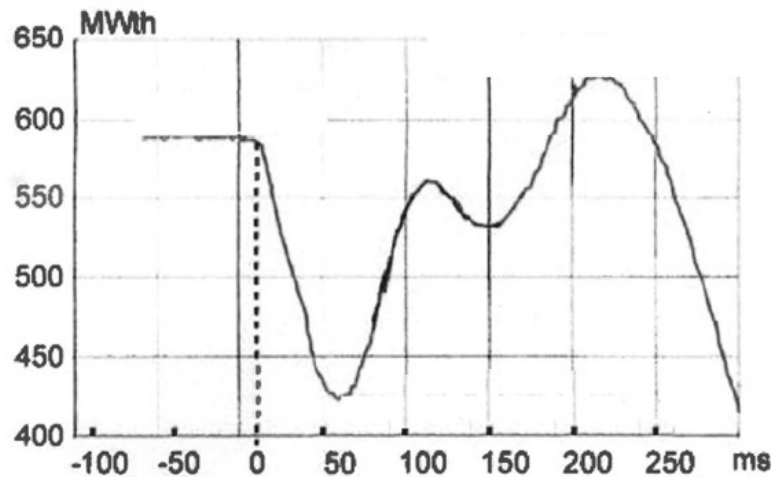


FIGURE 1.2 – Evolution de la puissance pendant un arrêt d’urgence de Phénix.

Le réacteur Phénix et les AURN sont présentés section 6.4.1.

1.2 Orientation donnée au travail de thèse

Comme nous le voyons, il y a deux enjeux principaux à cette thèse : le chaînage mécanique - neutronique et les techniques de couplage. D’un côté, la physique des réacteurs est intéressée par le chaînage mécanique - neutronique, qui est déjà novateur, plutôt que par le couplage. D’un autre côté, les bénéfices que l’on peut tirer d’une étude des techniques de couplage ne sont pas limités au cas d’application choisi.

Ainsi, lorsque le chaînage mécanique - neutronique a été réalisé, nous avons pris le temps de l’appliquer à un cas réacteur pertinent et d’en extraire les informations qui nous semblaient intéressantes avant de réaliser un couplage. Nous avons suivi deux stratégies pour la mise au point de ce chaînage, stratégies qui ont été identifiées dans la littérature comme les seules susceptibles de répondre à nos critères. La première consiste à travailler avec un maillage de calcul fixe sur lequel on projette la géométrie, possiblement déformée, du cœur. On la nomme ”pixellisation”, et elle a été mise en pratique dans APOLLO3® [45], code de neutronique de référence en développement au Service d’Etudes des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées (SERMA). La deuxième stratégie utilise un maillage de calcul qui se déforme en même temps que la géométrie du cœur. Elle a été mise en œuvre dans CAST3M [26], code de mécanique du Service d’Etudes Mécaniques et Thermiques (SEMT). Ces deux méthodes, très différentes dans leurs principes et mises en application, ont été confrontées sur le réacteur Phénix. En particulier, les essais de déformation mécanique du cœur, appelés gerbages, réalisés après l’arrêt du réacteur, en 2009 et en 2013, ont été calculés. On a ainsi pu confronter nos résultats à une expérience, juge de la validité des démarches suivies.

Par ailleurs, nous avons cherché à tirer des enseignements généraux sur le couplage à l’occasion de cette thèse. Le couplage, impliquant neutronique, thermique et mécanique, a été étudié dans CAST3M en utilisant ce qui a été mis au point à l’occasion du travail sur le chaînage. Toujours dans l’optique de se confronter à des données expérimentales, l’expérience Godiva [133], consistant à l’étude de pulses de puissance sur une sphère d’uranium métallique enrichie,

a été utilisée comme cas d'application. Différentes techniques de couplage, utilisables dans les transitoires impliquant la neutronique, ont été testées et des recommandations générales ont été tirées. Un véritable solveur commun aux disciplines couplées a également été développé et testé sur une simplification de Godiva. Cette démarche de couplage, dite intriquée, est en rupture avec ce qui se fait habituellement, mais les travaux de cette thèse montrent qu'elle peut permettre une résolution plus efficace du couplage. Des enseignements généraux sur cette approche du couplage ont pu être déduits de ce premier travail.

Présentons maintenant l'organisation choisie pour exposer ce travail dans le présent manuscrit.

1.3 Organisation de la thèse

La thèse est organisée en trois parties relativement indépendantes.

La première partie est une revue des techniques de couplage existantes dans la littérature. Le couplage est un domaine vaste, manipulé par des communautés aux sensibilités et aux objectifs différents. Une synthèse aussi exhaustive et rigoureuse que possible des techniques de couplage adaptées aux problématiques rencontrées en physique des réacteur a été tentée.

Au sein de cette première partie, le chapitre 2 introduit le sujet et propose un vocabulaire spécifique. Le chapitre 3 présente les techniques de couplage usuelles en stationnaire. Les méthodes de Gauss-Seidel et de Newton, ainsi que leurs variantes, ressortent clairement. Le chapitre 4 introduit le temps dans le couplage. On présente quelques méthodes spécifiques et montrons qu'il est toujours possible d'utiliser les méthodes du stationnaire. Le chapitre 5 conclut la partie. En particulier, il sensibilise aux éventuelles problématiques spatiales du couplage (qui ne sont pas vues dans cette thèse), et introduit aux techniques de couplage dites intriquées, consistant à développer un solveur commun aux disciplines impliquées.

La deuxième partie de cette thèse est dédiée au chaînage mécanique - neutronique, qui est déjà un sujet de recherche pour le développement de la filière RNR-Na.

Le chapitre 6 introduit la deuxième partie de la thèse et présente les méthodes de chaînage mécanique - neutronique de la littérature, ainsi que le réacteur Phénix qui est étudié dans cette partie. Le chapitre 7 présente une méthode de pixellisation, développée dans APOLLO3®, pour la réalisation de ce chaînage. Quelques analyses physiques du chaînage sont présentées ainsi qu'une tentative d'interprétation des essais de gerbage statique de Phénix. Le chapitre 8 présente une seconde méthode, à déformation de maillage, développée dans CAST3M. Cette méthode est plus adaptée à la réalisation d'un vrai couplage avec retour de la neutronique sur la mécanique et est donc privilégiée pour la suite de la thèse. L'exactitude de ses résultats est vérifiée par confrontation à la méthode de pixellisation du chapitre 7, sur les essais de gerbage de Phénix. Le chapitre 9 conclut la partie.

La troisième et dernière partie de cette thèse est consacrée à la réalisation et à l'étude d'un couplage entre neutronique, thermique et mécanique. Ce travail a été fait dans CAST3M, en se basant sur la technique de chaînage à maillage mobile introduite au chapitre 8.

Le chapitre 10 introduit la partie et présente l'expérience Godiva qui y a été utilisée. Le chapitre 11 présente les modèles monophysiques utilisés pour calculer l'expérience. En particulier,

en neutronique, on a eu recours à du *Simplified PN* (SPN) simulé en cinétique et factorisé par l'approche quasi-statique. Le chapitre 12 présente une étude des techniques de couplage entre les modèles du chapitre précédent. L'intérêt de la factorisation quasi-statique pour la réalisation de couplages est mis en avant. Le chapitre 13 est en rupture avec les précédents et présente une première réalisation d'un couplage intriqué entre neutronique, thermique et mécanique sur la phénoménologie de Godiva. Les systèmes linéaires issus des formulations éléments finis de chacun des problèmes sont résolus ensemble par un algorithme de Newton. On montre, sur un cas donné simple, qu'on obtient ainsi une convergence bien plus rapide qu'avec les techniques séquentielles. Enfin, le chapitre 14 conclut la partie.

Avant d'entrer dans le vif du sujet, il semble nécessaire de donner quelques bases de neutronique qui serviront tout au long de cette thèse.

1.4 Introduction à la neutronique

Il existe de nombreux ouvrages introduisant à la neutronique. On peut conseiller par exemple [21, 103, 72] pour une présentation plus détaillée du sujet.

Les neutrons, particules neutres, ont une faible probabilité d'interaction avec la matière et n'interagissent pas entre eux aux énergies qui nous intéressent. Grâce à cette indépendance des neutrons les uns par rapport aux autres, il est possible de reproduire leur marche un à un pour accéder aux caractéristiques de leur population. C'est ce que l'on appelle la méthode de Monte-Carlo. Elle n'introduit que très peu d'approximations mais nécessite des temps de calcul considérables.

Une alternative est de poser des équations de bilans neutroniques que l'on résout avec des méthodes numériques classiques (souvent éléments finis ou différences finies). Cette approche est dite déterministe. Elle a été privilégiée dans cette thèse, et nous l'introduisons donc plus longuement. Nous détaillons ici les équations fondamentales de la neutronique et donnons quelques éléments sur leurs méthodes de résolution.

A un temps t et un point d'espace \vec{r} fixés, le taux de réaction (nombre d'interactions par seconde et par unité de volume), noté ici τ_i , entre les neutrons allant à une vitesse V et dans une direction $\vec{\Omega}$ données et un certain type de noyau (ou isotope) i , supposés immobiles (voir section 6.3.9 pour une discussion de cette hypothèse), est obtenu comme le produit de la densité de neutrons n (que l'on peut appeler densité angulaire parce qu'elle dépend de $\vec{\Omega}$, elle dépend également de t , \vec{r} et V), de leur vitesse V , de la densité C_i de l'isotope i et d'une grandeur caractéristique de l'isotope appelée section efficace microscopique $\sigma_{micro\ i}$:

$$\tau_i = nVC_i\sigma_{micro\ i}.$$

Le taux de réaction total entre neutrons et matière est la somme des τ_i :

$$\tau = nV \sum_i C_i \sigma_{micro\ i}. \quad (1.1)$$

La section efficace a l'unité du surface : c'est la surface de la "cible" qu'est l'isotope pour le neutron, lui-même assimilé à un point. Retenons pour la suite que $\sigma_{micro\ i}$ n'est pas constante mais dépend de la vitesse des neutrons et de la température du milieu.

La forme de l'équation (1.1) conduit à introduire le flux neutronique (ou flux angulaire qui dépend des mêmes variables que n), noté ψ et égal au produit nV , et la section efficace macroscopique, notée σ et égale à la somme des produits $C_i \sigma_{micro\ i}$:

$$\sigma = \sum_i C_i \sigma_{micro\ i}. \quad (1.2)$$

On a alors simplement :

$$\tau = \psi \sigma.$$

Le flux neutronique a l'unité d'un flux tel qu'on peut le définir dans d'autres disciplines ($\text{m}^{-2} \text{s}^{-1}$) mais n'est pas de la même nature. Il s'agit d'une quantité scalaire qui dépend de la direction $\vec{\Omega}$ (les neutrons vont en tous sens), alors qu'un flux thermique par exemple est une quantité vectorielle donnant la direction de propagation de la chaleur. Dans l'approximation de la diffusion que nous verrons plus loin, et qui consiste à négliger la dépendance du flux en $\vec{\Omega}$, le gradient du flux neutronique, qui joue le même rôle dans les équations neutroniques que le flux thermique en thermique, est appelé courant neutronique.

Les neutrons peuvent faire trois types d'interaction avec la matière. Ils peuvent simplement se faire absorber et disparaître. Ils peuvent également faire une collision, éventuellement avec une direction de propagation ou une vitesse différentes après le choc. Ils peuvent enfin provoquer une fission du noyau. Cette fission va générer de nouveaux neutrons immédiatement après la fission (dits prompts) et des produits de fission (fragments de la fission). Certains de ces produits de fission émettent, bien plus tard et spontanément, par décroissance radioactive, de nouveaux neutrons (dits retardés). On appelle ces produits de fission précurseurs de neutrons retardés.

Nous allons adopter les notations suivantes :

- \vec{r} , E , $\vec{\Omega}$ et t sont respectivement les variables d'espace, d'énergie (directement liée à la vitesse des neutrons), de direction de propagation et de temps ;
- σ_t est la section efficace macroscopique de réaction totale, somme des sections d'absorption, de transfert et de fission ;
- $\sigma_s(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$ est la section efficace macroscopique différentielle de diffusion de l'énergie E' et direction $\vec{\Omega}'$ vers l'énergie E et la direction $\vec{\Omega}$ (on parle de section efficace de transfert lorsque les variables sont discrétisées) ;
- $\nu \sigma_f$ est le produit de la section efficace macroscopique de fission avec le nombre moyen de neutrons émis par fission ;
- β_l est la proportion de neutrons de fission émis avec retard par décroissance d'un précurseur de type l ;
- β est la somme des β_l ;
- $\chi_p(E' \rightarrow E)$ est la probabilité qu'un neutron prompt issu d'une fission provoquée par un neutron d'énergie E' soit d'énergie E ;
- C^l est la concentration en précurseurs de type l de neutrons retardés ;
- λ_l est la constante de décroissance radioactive des précurseurs de type l ;
- $\chi_l(E)$ est la probabilité qu'un neutron retardé émis par un précurseur de type l soit d'énergie E .

En partant du principe que les neutrons se déplacent en ligne droite entre deux interactions, un bilan neutronique permet d'établir l'équation fondamentale de la neutronique, appelée équation de Boltzmann (qui porte sur des quantités moyennes) :

$$\begin{aligned}
 & \underbrace{\frac{1}{V} \frac{\partial \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)}{\partial t}}_{\text{Inertie des neutrons en vol}} + \underbrace{\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)}_{\text{Propagation en ligne droite}} + \underbrace{\sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)}_{\text{Disparition par interaction avec la matière}} = \\
 & \underbrace{\int_0^\infty dE' \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d\Omega' \sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t)}_{\text{Transfert de direction ou d'énergie par interaction avec un noyau}} \\
 & + \underbrace{(1 - \beta) \int_0^\infty dE' \chi_p(\vec{r}, E' \rightarrow E) \nu \sigma_f(E', \vec{r}) \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d\Omega' \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t)}_{\text{Production de neutrons prompts par fission}} \\
 & + \underbrace{\sum_l \chi_l(\vec{r}, E) \lambda_l C^l(\vec{r})}_{\text{Emission de neutrons retardés}} .
 \end{aligned} \tag{1.3}$$

L'équation (1.3) doit être résolue en même temps que celle qui donne l'évolution des C^l :

$$\underbrace{\frac{\partial C^l(\vec{r})}{\partial t}}_{\text{Inertie}} = \underbrace{-\lambda_l C^l(\vec{r})}_{\text{Décroissance radioactive}} + \underbrace{\beta_l \int_0^\infty dE' \nu \sigma_f(\vec{r}) \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d\Omega' \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t)}_{\text{Production comme produits de fission}} . \tag{1.4}$$

La forme stationnaire de ces équations s'obtient en annulant les dérivées en temps. On obtient alors, après avoir injecté la solution explicite de (1.4) dans (1.3) :

$$\begin{aligned}
 & \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) + \sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \\
 & \int_0^\infty dE' \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d\Omega' \sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t) \\
 & + \int_0^\infty dE' \chi(\vec{r}, E' \rightarrow E) \nu \sigma_f(\vec{r}) \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d\Omega' \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t),
 \end{aligned} \tag{1.5}$$

avec $\chi(E' \rightarrow E)$ la probabilité qu'un neutron prompt ou retardé issu d'une fission provoquée par un neutron d'énergie E' soit d'énergie E .

Une difficulté de la neutronique est que l'équation (1.5) n'a, en général, pas de solution non nulle. Cela a un sens physique : une distribution donnée de sections efficaces ne permet pas forcément d'entretenir exactement une réaction en chaîne sans variation de la population neutronique. Pour pouvoir tout de même résoudre une équation stationnaire, on introduit généralement le K_{eff} , qui représente le nombre moyen de neutrons issus d'une fission qui provoquent, après transferts éventuels, une nouvelle fission. Il est utilisé pour renormaliser le terme de fission comme suit :

$$\begin{aligned}
& \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) + \sigma_t^g(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \\
& \int_0^\infty dE' \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d\Omega' \sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t) \\
& + \frac{1}{K_{eff}} \int_0^\infty dE' \chi(\vec{r}, E' \rightarrow E) \nu \sigma_f(\vec{r}) \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d\Omega' \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t).
\end{aligned} \tag{1.6}$$

L'équation (1.6), appelée équation critique (ou équation du réacteur critique associé), a cette fois toujours des couples (ψ, K_{eff}) solutions. Mathématiquement [89, 2], (1.6) est un problème à valeurs propres généralisé. Seule la solution associée à la plus grande valeur propre (K_{eff}) est physique : le flux n'est pas non négatif pour les autres. C'est la seule solution que l'on considère dans cette thèse, et on dira que c'est la solution du problème critique. Le K_{eff} obtenu ainsi donne une information sur l'écart à la stationnarité. La population de neutrons est stationnaire (on dit que le système est critique) lorsque $K_{eff} = 1$, elle croît (on dit que le système est sur-critique) lorsque $K_{eff} > 1$, et elle décroît (on dit que le système est sous-critique) lorsque $K_{eff} < 1$.

La résolution de (1.6) ou (1.3) dans un code de calcul passe par une discrétisation des variables \vec{r} , E , $\vec{\Omega}$ et t :

- \vec{r} : la géométrie du réacteur est décrite de façon plus ou moins détaillée. On homogénéise souvent des régions.
- E : on résout généralement pour un nombre fini d'énergies ou de vitesses données. On parle de groupes d'énergie.
- $\vec{\Omega}$: il existe plusieurs traitement de la variable angulaire.
 - La méthode SN résout un nombre fini de directions données.
 - La méthode PN décompose les dépendances en $\vec{\Omega}$ sur une base adaptée (appelée harmoniques sphériques) et tronque à un ordre donné les décompositions.
 - La méthode SPN introduit des hypothèses de régularité de la géométrie qui permettent de simplifier les équations de la méthode PN en les traitant comme localement 1D.
 - L'approximation de la diffusion consiste, quant à elle, à considérer le flux isotrope. On travaille alors avec $\phi(\vec{r}, E, t) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d\Omega' \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}', t)$. Les sections de transfert σ_s sont supposées isotropes et le terme d'advection $\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ devient diffusion : $-\nabla D(\vec{r}, E) \nabla \phi(\vec{r}, E, t)$. Le coefficient de diffusion est souvent inversement proportionnel à une section efficace, l'idée étant que la présence de la matière freine la propagation des neutrons. On a travaillé avec cette hypothèse dans cette thèse. Voir par exemple [11] pour le calcul de coefficients de diffusion dans des zones de "vide", où il faut prendre une autre modélisation.
- t : le temps est découpé en pas de temps de taille finie.

Il est usuel de décomposer la résolution des équations en plusieurs niveaux [72, 89]. On commence avec des discrétisations spatiale, angulaire et énergétique précises sur une fraction du réacteur, et avec une prise en compte simplifiée de l'environnement. On parle de calculs "réseaux". On en déduit des sections efficaces équivalentes utilisées dans un calcul à l'échelle du cœur mais avec des discrétisations moins fines. On ne présentera dans cette thèse que des

calculs dits "cœurs", et on parlera, par abus de langage, d'auto-protection pour les calculs amonts qui ont permis de générer les sections efficaces que l'on utilise. Lorsque l'état du cœur varie, ces sections efficaces "cœurs" peuvent ne plus être valables. On peut alors être amené à refaire les calculs réseaux, ou, plus généralement, à utiliser des sections efficaces tabulées en fonction des différents paramètres susceptibles de varier et de faire varier le flux obtenu par les calculs réseaux.

Soulignons le fait que les données d'entrée de la neutronique sont des propriétés matérielles. Elles dépendent donc de la configuration géométrique du système et de la densité des milieux d'après (1.2). Cela explique que la neutronique soit sensible aux perturbations de cette géométrie et des densités des milieux, perturbations qui peuvent être causées par la thermomécanique (déformations mécaniques, dilatations thermiques) ou la thermo-hydraulique (variation de la densité du caloporteur). Nous avons également souligné que les sections microscopiques, et donc les sections macroscopiques, sont fonctions de la température des milieux. Cela renforce l'influence que peut avoir la thermique sur la neutronique (on parle d'effet Doppler pour le combustible). Nous n'aurons cependant pas beaucoup l'occasion d'illustrer cet effet par la suite.

Première partie

Techniques de couplage usuelles

Table des matières

Chapitre 2	Introduction de la première partie	17
2.1	Vocabulaire	17
Chapitre 3	Les techniques de couplage en stationnaire	19
3.1	Rappel de la problématique	19
3.2	Méthode de Gauss-Seidel	20
3.2.1	Présentation de la méthode	20
3.2.2	Equivalence avec le point fixe	20
3.2.3	Condition générale de convergence	21
3.2.4	Conditions pratiques de convergence	22
3.2.5	Variante avec relaxation	24
3.2.6	Accélération du point fixe	26
3.2.7	Itérations de Jacobi	28
3.2.8	Conclusion	28
3.3	Méthode de Newton	28
3.3.1	Présentation de la méthode	28
3.3.2	Etude de la méthode	29
3.3.3	Variante avec relaxation	30
3.3.4	Algorithme de Newton inexact	30
3.3.5	Conclusion	31
3.4	Méthode JFNK (Jacobian-Free Newton-Krylov)	31
3.4.1	Présentation de la méthode	31
3.4.2	Utilisation et intérêt de la méthode JFNK dans le cadre d'un couplage .	35
3.4.3	BiCGStab, une alternative à la méthode GMRES	35
3.5	Méthode JFNK préconditionnée	36
3.5.1	Notion de conditionnement	36
3.5.2	Généralités sur le préconditionnement	36
3.5.3	Application au JFNK	37
3.6	Méthode ABN (Approximate Block Newton)	38
3.6.1	Présentation	38
3.6.2	Une variante : la méthode ABN-J.	39
3.6.3	Conclusion	41

3.7	Méthode ASPIN (nonlinear Additive Schwarz Preconditioned Inexact Newton)	41
3.7.1	Notion de préconditionnement non linéaire	41
3.7.2	Préconditionnement additif de Schwarz non linéaire	42
3.7.3	L'algorithme ASPIN	42
3.7.4	Utilisation dans un cas de couplage	43
3.7.5	Conclusion	44
3.8	Méthodes de prédicteur-correcteur	45
3.8.1	Présentation	45
3.8.2	Exemple	45
Chapitre 4	Les techniques de couplage en transitoire	47
4.1	Méthodes directement issues des techniques stationnaires	47
4.1.1	Equivalence avec le problème stationnaire	47
4.1.2	Couplage explicite	48
4.1.3	Gauss-Seidel et Newton	49
4.1.4	Conclusion	50
4.2	Amélioration de la précision du couplage explicite	50
4.2.1	Maillages temporels décalés	50
4.2.2	Traitement d'ordre plus élevé des non-linéarités	51
4.2.3	Conclusion	51
4.3	Contrôle du pas de temps	52
Chapitre 5	Conclusion de la première partie	53
5.1	Aperçu de la problématique spatiale du couplage	53
5.2	Quelques exemples de couplages intriqués	54
5.3	Synthèse	55

Introduction de la première partie

Dans cette partie de la thèse nous nous proposons de recenser, expliquer et comparer les techniques de couplage les plus courantes. Nous nous concentrons sur les techniques de couplage dites séquentielles, beaucoup plus courantes et consistant à faire communiquer des solveurs distincts, par opposition aux techniques dites intriquées, où un solveur directement multiphysique est développé. La mise en forme et les méthodes de conversion des données avant échange ne sont pas étudiées en détail ici. On se focalise plutôt sur l’algorithmique du couplage. Ce travail a bénéficié d’expérimentations numériques effectuées lors de stages d’Antonin Dussaix [32] et de Romain Bontemps [14]. Il a également fait l’objet d’une note technique CEA [82].

Le chapitre 3 traite d’un calcul sans intervention explicite du temps. Celui-ci est introduit ensuite dans le chapitre 4. Nous verrons notamment comment les méthodes de couplage ”stationnaire” peuvent être réutilisées lors d’un couplage en transitoire. Le chapitre 5 conclut la discussion. En particulier, il donne une introduction aux problématiques spatiales du couplage ainsi que quelques éléments sur le couplage intriqué.

2.1 Vocabulaire

Lorsqu’on travaille à la frontière de plusieurs disciplines physiques avec l’aide des mathématiques appliquées, une difficulté récurrente est la barrière de la langue. Certains termes, en particulier en français, sont en effet parfois utilisés dans des milieux différents pour désigner des notions différentes. Dans d’autres cas, les notions elles-mêmes sont confondues. Pour éviter les confusions, il est bon de clarifier les mots utilisés le plus tôt possible. C’est ce que nous nous proposons de faire ici en traduisant le vocabulaire défini dans [57] pour les quatre premières définitions.

Couplage de modèles physiques fort (par opposition à faible) : Se dit *strong* (par opposition à *weak*) en anglais. On dit qu’un couplage est fort lorsque les modèles physiques en jeu s’influencent fortement les uns les autres.

Couplage de modèles numériques ferme (par opposition à souple) : Se dit *tight* (par opposition à *loose*) en anglais. Un modèle numérique est couplé fermement lorsque les variables sont toujours mises à jour de façon synchronisée. Notons qu’il n’y a pas de correspondance entre

un couplage physique fort (ou faible) et un couplage de modèles ferme (ou souple). En effet, on peut utiliser une méthode numérique ferme ou souple pour calculer un couplage physique fort ou faible. Les deux paradigmes de couplage peuvent atteindre les mêmes précisions numériques, et leur efficacité dépendra du cas étudié.

Méthode numérique explicite, implicite ou semi-implicite : Se dit *explicit*, *implicit* et *semi-implicit* en anglais. Dans une méthode explicite, les états futurs d'un problème temporel sont calculés à l'aide de formules n'impliquant que des quantités déjà connues aux pas de temps précédents. À l'inverse, une méthode entièrement implicite (*fully implicit*) n'utilise que des quantités actuelles inconnues et un processus d'inversion. Dans une méthode semi-implicite des termes explicites et implicites sont mélangés. Les méthodes explicites sont classiquement très rapides sur chaque pas de temps, mais ont des restrictions de stabilité sur le pas de temps. Les méthodes implicites sont, à l'inverse, plus longues par pas de temps mais ont des propriétés de stabilité très favorables. Les méthodes semi-implicites sont, quant à elles, généralement soumises à des contraintes sur le pas de temps issues des termes explicites, mais permettent d'atteindre une précision optimale.

Couplage séquentiel ou entre codes (par opposition à intriqué ou entre modèles) : Dans [57] on trouve le terme *single-domain approach* (resp. *multi-domain approach*) pour désigner ce qu'on appelle ici un couplage intriqué (resp. couplage séquentiel). On voit aussi souvent dans la littérature le terme *black box coupling* pour couplage séquentiel. Dans un couplage intriqué, on utilise un solveur unique. Dans un couplage séquentiel on utilise des solveurs distincts sur les différents domaines spatiaux ou physiques que l'on modélise. Par nature, un couplage intriqué est ferme, mais un couplage séquentiel peut être ferme ou souple. L'approche intriquée peut être conceptuellement simple et directe, ainsi que particulièrement efficace. Cependant sa mise en oeuvre peut être ardue, elle risque de manquer de flexibilité, la résolution peut être coûteuse et surtout sa généralisation à des modèles plus complexes n'est pas toujours possible. À l'inverse, l'approche "diviser pour régner" du couplage séquentiel permet l'utilisation des modèles et des codes de calcul déjà existants les plus performants sur chacun des domaines du problème. Le revers de la médaille est le besoin de mettre au point des techniques de communication et de couplage qui soient efficaces, stables et précises. Nous allons passer en revue les techniques usuelles utilisées à cet effet dans cette partie de thèse.

Algorithme ou schéma numérique stable : Se dit *stable* en anglais. Un algorithme ou un schéma est dit stable si les solutions numériques sont bornées (indépendamment des pas de temps, d'espace et des nombres d'itérations).

Équilibre stable : Un système physique est dans un équilibre stable lorsqu'il en reste proche après une petite perturbation de ses paramètres.

Les techniques de couplage en stationnaire

3.1 Rappel de la problématique

Supposons que nous ayons deux codes, f_1 et f_2 , travaillant sur les variables $x_2 \in \mathbb{R}^{d_2}$ et $x_1 \in \mathbb{R}^{d_1}$. f_1 nous donne x_1 connaissant x_2 , ce que l'on notera $x_1 = f_1(x_2)$ et inversement, f_2 nous donne x_2 en fonction de x_1 , c'est à dire $x_2 = f_2(x_1)$.

Réaliser le couplage consiste donc à rechercher la solution globale qui vérifie :

$$\begin{cases} x_1 = f_1(x_2) \\ x_2 = f_2(x_1). \end{cases} \quad (3.1)$$

Souvent le couplage sera formulé avec une dépendance des fonctions f_i en x_i :

$$\begin{cases} x_1 = f_1(x_1, x_2) \\ x_2 = f_2(x_1, x_2). \end{cases} \quad (3.2)$$

Il peut y avoir deux raisons à cela. Ce peut être un choix de ne pas chercher à converger chacun des codes précisément tant que la solution commune n'est pas atteinte. On se rapproche alors d'une méthode de résolution intriquée. Il arrive également qu'il n'y ait pas de sens à converger un code sur x_i sans mettre à jour simultanément x_j . Par défaut, nous supposons que le couplage est de la forme (3.2).

Nous réécrivons aussi parfois le système sous la forme suivante :

$$\begin{cases} F_1(x_1, x_2) = f_1(x_1, x_2) - x_1 = 0 \\ F_2(x_1, x_2) = f_2(x_1, x_2) - x_2 = 0. \end{cases} \quad (3.3)$$

Il est possible de coupler plus de deux équations avec les techniques que nous présentons ici. La généralisation étant simple, pour alléger les écritures nous nous limiterons aux couplages entre deux disciplines.

3.2 Méthode de Gauss-Seidel

3.2.1 Présentation de la méthode

La méthode de Gauss-Seidel (souvent nommée méthode ou itérations de Picard dans la littérature), qui met en œuvre un couplage souple, est très courante et très facile à mettre en place. Pour illustration, on peut citer [23] et [78] qui recensent les travaux de couplage entre neutronique et thermohydraulique. La majorité s'appuie sur ce type de méthodes. Il s'agit simplement d'itérer sur la résolution des codes jusqu'à convergence.

Notons avec un exposant n l'indice d'itération. A partir de données initiales $(x_1^{(0)}, x_2^{(0)})$, on itère en posant :

$$\begin{cases} x_1^{(n+1)} = f_1(x_1^{(n)}, x_2^{(n)}) \\ x_2^{(n+1)} = f_2(x_1^{(n+1)}, x_2^{(n)}). \end{cases} \quad (3.4)$$

On s'arrête généralement lorsque les incréments $\varepsilon_1^{(n+1)} = \|x_1^{(n+1)} - x_1^{(n)}\|$ et $\varepsilon_2^{(n+1)} = \|x_2^{(n+1)} - x_2^{(n)}\|$ deviennent suffisamment petits. On utilise ce critère faute de mieux, et on voit qu'il ne donne pas d'information sur la distance à la solution.

On voit facilement que la méthode, si elle converge, ne peut converger que vers une solution du problème. Cependant, la convergence n'est pas systématique.

3.2.2 Equivalence avec le point fixe

L'algorithme dit "du point fixe", permet de résoudre une équation du type $x = f(x)$. Il consiste à itérer ainsi :

$$x^{(n+1)} = f(x^{(n)}).$$

La méthode de Gauss-Seidel peut être vue comme un point fixe en posant :

$$x^{(n)} = \begin{pmatrix} x_1^{(n)} \\ x_2^{(n)} \end{pmatrix} \text{ et } f \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(x_1, x_2) \\ f_2(f_1(x_1, x_2), x_2) \end{pmatrix}.$$

Si une de nos fonctions, disons f_1 , ne dépend pas de la variable qu'elle permet de calculer, c'est à dire x_1 (comme c'est souvent le cas), on remarque que chaque itération est équivalente à $x_2^{(n+1)} = f_2(f_1(x_2^{(n)}), x_2^{(n)})$. C'est une autre façon de se ramener au point fixe, qui a l'avantage de réduire la dimension de l'espace dans lequel on travaille.

La suite de la discussion sur la méthode de Gauss-Seidel utilise cette équivalence. On s'intéressera donc aux propriétés du point fixe.

3.2.3 Condition générale de convergence

Condition de convergence : Soit E un espace métrique complet et f une application de E dans E . Si f est k -contractante (ie $\forall (a, b) \in E^2, d(f(a), f(b)) \leq kd(a, b)$ avec $k < 1$. d est la distance entre deux points de E .), alors il existe un unique point fixe x_{sol} de f et toute suite vérifiant $x^{(n+1)} = f(x^{(n)})$ converge vers x_{sol} .

Démonstration :

Soit $x^{(0)} \in E$. On note $x^{(m)} = f^m(x^{(0)})$ pour tout m entier naturel. Par récurrence simple on a :

$$\forall n \in \mathbb{N}, d(x^{(n)}, x^{(n+1)}) \leq k^n d(x^{(0)}, x^{(1)}).$$

On en déduit :

$$\begin{aligned} \forall n \in \mathbb{N}, \forall p \in \mathbb{N}^*, d(x^{(n)}, x^{(n+p)}) &\leq d(x^{(n)}, x^{(n+1)}) + \dots + d(x^{(n+p-1)}, x^{(n+p)}) \\ &\leq (k^n + k^{n+1} + \dots + k^{n+p}) d(x^{(0)}, x^{(1)}) \\ &= k^n \frac{1 - k^p}{1 - k} d(x^{(0)}, x^{(1)}) \\ &\leq \frac{k^n}{1 - k} d(x^{(0)}, x^{(1)}). \end{aligned}$$

$(x^{(n)})_n$ est donc une suite de Cauchy et converge vers une limite $x^{(\infty)}$, E étant complet. Par passage à la limite de $x^{(n+1)} = f(x^{(n)})$ on en déduit que $x^{(\infty)}$ est solution de $x = f(x)$.

Supposons maintenant qu'il y ait deux solutions x_{sol1} et x_{sol2} de $x = f(x)$.

Alors $d(x_{sol1}, x_{sol2}) = d(f(x_{sol1}), f(x_{sol2})) \leq kd(x_{sol1}, x_{sol2})$. On en déduit $x_{sol1} = x_{sol2}$ puisque $k < 1$. ■¹

On remarque que l'on a obtenu au passage une majoration de l'erreur que l'on peut écrire :

$$d(x^{(n)}, x_{sol}) \leq \frac{k^n}{1 - k} d(x^{(0)}, x^{(1)}) \quad (3.5)$$

par passage à la limite quand p tend vers $+\infty$. La convergence est donc linéaire et est d'autant plus rapide que k est petit.

On remarque également qu'il suffit que f soit contractante sur une boule centrée sur une solution, et que l'initialisation y soit choisie, pour que l'algorithme converge. C'est là que réside la difficulté de son utilisation.

1. Ce carré noir indique la fin d'une démonstration.

3.2.4 Conditions pratiques de convergence

La dernière remarque nous amène à nous intéresser au voisinage de la solution pour déterminer si l'algorithme peut converger.

Nous utilisons l'inégalité de Taylor-Lagrange, pour une fonction f de \mathbb{R}^m dans \mathbb{R}^m de régularité suffisante. On note J_a la jacobienne de f en a . S'il existe un réel M tel que $\|J_{a+th}\| \leq M \forall t \in]0, 1[$ alors :

$$\|f(a+h) - f(a)\| \leq M\|h\|.$$

On note x_{sol} la solution du point fixe (nous supposons l'existence et l'unicité de la solution ici). On suppose qu'il existe un réel M tel que $\|J_x\| \leq M \forall x \in B(x_{sol}, r)$. $B(x_{sol}, r)$ est la boule de centre x_{sol} et de rayon r , un réel quelconque. Alors on a plus généralement :

$$\forall a, b \in B(x_{sol}, r), \|f(b) - f(a)\| \leq M\|b - a\|.$$

Ainsi si $M < 1$, cela montre bien que f est contractante sur $B(x_{sol}, r)$, et que l'algorithme converge si $x^{(0)} \in B(x_{sol}, r)$ d'après ce qui précède. Il est donc suffisant que $\|J_x\| \leq M < 1$ autour de la solution. Si on utilise la norme L^2 , on peut écrire la condition suffisante suivante ($\rho(A)$ désigne le rayon spectral de la matrice A , c'est-à-dire $\rho(A) = \max_i |\lambda_i|$ où les λ_i sont les valeurs propres, éventuellement complexes, de A) :

$$\|J_x\|_2 = \sqrt{\rho(J_x^t J_x)} \leq M < 1$$

Au voisinage de la solution, et que l'initialisation soit choisie dans ce voisinage. Comme k précédemment, la norme de la jacobienne permet de minorer la vitesse de convergence de l'algorithme.

On peut chercher une condition moins exigeante en utilisant le lemme 3.9.5-2 de [71] qui nous dit que :

$$\begin{aligned} &\forall A, \text{ pour toute norme matricielle on a : } \rho(A) \leq \|A\|. \\ &\forall A, \forall \varepsilon, \text{ il existe une norme matricielle telle que } \rho(A) \leq \|A\| \leq \rho(A) + \varepsilon. \end{aligned}$$

Ainsi, si on a, en la solution x_{sol} , $\rho(J_{x_{sol}}) < 1$, pour une certaine norme on a $\|J_{x_{sol}}\| \leq M < 1$. Par continuité de la norme on a alors, avec la même norme, $\|J_x\| \leq M' < 1$ sur un voisinage de x_{sol} . On a ainsi une condition suffisante de convergence locale (grâce à l'équivalence des normes en dimension finie il suffit de montrer la convergence de la suite pour une norme quelconque), moins exigeante que la précédente puisque la première proposition du lemme nous indique notamment que $\rho(A) \leq \sqrt{\rho(A^t A)} \forall A$.

On va chercher à montrer que $\rho(J_{x_{sol}}) < 1$ est en fait une condition nécessaire de "bon comportement de l'algorithme" dans un sens que l'on précisera. On dira ensuite, par abus de langage, que c'est une condition nécessaire de convergence.

Démonstration :

En supposant f suffisamment régulière, utilisons l'inégalité de Taylor-Lagrange pour quantifier l'erreur commise. Notons $D^2 f_x$ l'application linéaire de \mathbb{R}^m dans $\mathcal{L}(\mathbb{R}^m)$, telle que

$(D^2 f_{ab})_k = \sum_{i,j} \frac{\partial^2 f_k(x)}{\partial x_i \partial x_j} a_i b_j$. S'il existe un réel R tel que $\|D^2 f_{x_{sol}+t(x^{(n)}-x_{sol})}\| \leq R \forall t \in]0, 1[$ alors :

$$\|f(x_{sol} + (x^{(n)} - x_{sol})) - f(x_{sol}) - J_{x_{sol}}(x^{(n)} - x_{sol})\| \leq \frac{R\|x^{(n)} - x_{sol}\|^2}{2},$$

Soit, en introduisant η_n un vecteur dont la norme est bornée par $\frac{R}{2}$:

$$f(x_{sol} + (x^{(n)} - x_{sol})) = f(x_{sol}) + J_{x_{sol}}(x^{(n)} - x_{sol}) + \eta_n \|x^{(n)} - x_{sol}\|^2$$

On en déduit, comme on a $f(x_{sol}) = x_{sol}$:

$$x^{(n+1)} = J_{x_{sol}} x^{(n)} + x_{sol} - J_{x_{sol}} x_{sol} + \eta_n \|x^{(n)} - x_{sol}\|^2.$$

On a ainsi un processus qui peut s'écrire de la forme :

$$x^{(n+1)} = J_{x_{sol}} x^{(n)} + c + \varepsilon_n.$$

ε_n est un vecteur d'erreur dont la norme est pilotée par $\|x^{(n)} - x_{sol}\|^2$. On a le résultat général, issu de [71], qui nous dit que la suite $x^{(n+1)} = Ax^{(n)} + c$ converge si et seulement si $\rho(A) < 1$. On "sent" que l'ajout d'une erreur ε_n devrait rendre la convergence plus difficile et que $\rho(J_{x_{sol}}) < 1$ pourrait par conséquent être une condition nécessaire de convergence. Il est difficile de le montrer rigoureusement du fait que ε_n pourrait au contraire servir à compenser une déviation du schéma. Nous allons montrer que, du fait que ε_n est quadratique en l'écart à la solution, cela n'est pas possible localement. Même si une compensation d'erreur pourrait avoir lieu lorsque l'écart à la solution devient grand, ce n'est pas le type de comportement attendu pour l'algorithme (la solution ne serait pas stable notamment), et on considérera qu'il ne converge pas.

On part avec $x^{(0)} = x_{sol} + \mu_1$. μ_1 est le vecteur propre de la plus grande valeur propre λ_1 (en valeur absolue) de $J_{x_{sol}}$.

On a $x^{(1)} = J_{x_{sol}} x^{(0)} + c + \varepsilon_0 = x_{sol} + \lambda_1 \mu_1 + \varepsilon_0$. On a $\|\varepsilon_0\| \leq K \|\mu_1\|^2$. K est fixé dans un voisinage choisi de la solution.

Ainsi on a $\|x^{(1)} - x_{sol}\| \geq |\lambda_1| \|\mu_1\| - K \|\mu_1\|^2 = \|\mu_1\| (|\lambda_1| - K \|\mu_1\|)$. Or on avait $\|x^{(0)} - x_{sol}\| = \|\mu_1\|$, donc si $|\lambda_1| - K \|\mu_1\| > 1$, alors $x^{(1)}$ s'est éloigné de la solution. Si $|\lambda_1| \geq 1$, c'est possible en choisissant μ_1 tel que $\|\mu_1\| \leq \frac{1}{2K} (|\lambda_1| - 1)$.

On a donc montré que pour un écart à la solution bien choisi mais arbitrairement petit, faire une itération de l'algorithme éloigne de la solution. Ce n'est pas le comportement attendu d'un algorithme convergent, et nous dirons donc que $\rho(J_{x_{sol}}) < 1$ est une condition nécessaire de convergence. ■

Nous avons donc :

- Une condition suffisante de convergence : Si $\sqrt{\rho(J_x^t J_x)} \leq M < 1$ sur un voisinage de la solution, alors l'algorithme converge si $x^{(0)}$ est choisi dans ce voisinage.

- Une condition nécessaire de convergence : $\rho(J_{x_{sol}}) < 1$. C'est aussi une condition suffisante de convergence pour $x^{(0)}$ choisi dans un certain voisinage de la solution.

A une dimension, les deux critères sont identiques et on a donc convergence si et seulement si $|f'(a)| \leq M < 1$ au voisinage de la solution.

Si on revient au problème de couplage posé sous la forme (3.1), cette condition de convergence s'écrit $|f'_2(x_1)f'_1(x_2)| < 1$, ou encore $\left| \frac{\partial F_1(x_1, x_2)}{\partial x_2} \frac{\partial F_2(x_1, x_2)}{\partial x_1} \right| < 1$, si on écrit le problème sous la forme (3.3).

Notons que ce sont les dérivées croisées, c'est-à-dire les termes de couplage, qui interviennent dans le critère de convergence, mais aussi dans la vitesse de convergence, celle-ci dépendant de la norme de la jacobienne.

3.2.5 Variante avec relaxation

Une variante de la méthode du point fixe consiste à introduire une relaxation $\alpha > 0$. On parle de surrelaxation lorsque $\alpha > 1$. Les itérations s'écrivent alors $x^{(n+1)} = (1 - \alpha)x^{(n)} + \alpha f(x^{(n)})$. Voyons ce que cela donne sur le critère et la vitesse de convergence.

On voit qu'en posant $g = (1 - \alpha)Id + \alpha f$, on se ramène au point fixe classique avec $x^{(n+1)} = g(x^{(n)})$. Les résultats précédents s'appliquent donc sur g .

Examinons d'abord le cas à une dimension.

a. A une dimension

On a $g' = (1 - \alpha) + \alpha f'$. Le point fixe converge à sa vitesse maximale lorsque la dérivée de la fonction est nulle en la solution. Cela nous amène à une relaxation optimale : $\alpha = \frac{1}{1 - f'(x_{sol})}$. Cette valeur sera généralement inconnue puisqu'elle se base sur une propriété de f en la solution x_{sol} , qui est inconnue a priori. Nous allons donc regarder de façon plus générale le comportement de l'algorithme en fonction de α .

Le critère de convergence $|g'(x_{sol})| < 1$ nous donne $f'(x_{sol}) \in]1 - \frac{2}{\alpha}, 1[$.

La vitesse de convergence dépend de la valeur maximale de $|g'|$ autour de la solution x .

Comparons g' à f' . $g' - f' = (1 - \alpha)(1 - f')$. Comme $f' < 1$, on a donc $g' > f' \Leftrightarrow \alpha < 1$.

Comparons maintenant g' à $-f'$. $g' + f' = (1 - \alpha) + (\alpha + 1)f'$. Ainsi, $g'(x) > -f'(x) \Leftrightarrow \alpha < \frac{1 + f'(x)}{1 - f'(x)}$.

Nous avons donc :

- Si $f'(x_{sol}) < -1$, c'est-à-dire si l'algorithme, sans relaxation, ne converge pas avec un comportement oscillant, une relaxation $\alpha \in \left] 0, \frac{2}{1 - f'(x_{sol})} \right[$ permet de le faire converger. L'optimum est $\alpha = \frac{1}{1 - f'(x_{sol})}$.

- Si $f'(x_{sol}) \in]-1, 0[$, on peut améliorer la vitesse de convergence avec $\alpha \in \left] \frac{1 + f'(x_{sol})}{1 - f'(x_{sol})}, 1 \right[$. L'optimum est $\alpha = \frac{1}{1 - f'(x_{sol})}$.
- Si $f'(x_{sol}) \in]0, 1[$, on peut améliorer la vitesse de convergence avec $\alpha \in \left] 1, \frac{1 + f'(x_{sol})}{1 - f'(x_{sol})} \right[$.
On parle alors de surrelaxation. L'optimum est $\alpha = \frac{1}{1 - f'(x_{sol})}$.
- Si $f'(x_{sol}) > 1$, c'est-à-dire si l'algorithme, sans relaxation, a un comportement non convergent sans oscillation, il gardera ce comportement $\forall \alpha > 0$.

$f'(x_{sol})$ n'étant pas connue a priori, la difficulté est de déterminer α .

b. A plus d'une dimension

Pour améliorer la convergence de g nous allons chercher à minimiser le rayon spectral de sa jacobienne en x , solution du problème. Nous avons la propriété générale suivante, facile à vérifier, où $\sigma(A)$ désigne le spectre de A , c'est-à-dire l'ensemble de ses valeurs propres :

$$\forall A, \forall P \text{ polynome } P(\sigma(A)) = \sigma(P(A)).$$

Ainsi l'analyse précédente, faite à une dimension, s'applique à chacune des valeurs propres de la jacobienne de g . Notons λ_i ses valeurs propres, et $\lambda_i(\alpha)$ celles obtenues avec la relaxation. Nous avons :

$$\lambda_i(\alpha) = 1 + \alpha(\lambda_i - 1).$$

On cherche à minimiser $\max_i |\lambda_i(\alpha)|$.

Comme précédemment, $\lambda_i > 1 \Leftrightarrow \lambda_i(\alpha) > 1 \forall \alpha > 0$. La relaxation ne permet donc pas de faire converger l'algorithme si $\exists \lambda_i > 1$, et on considère donc que $\lambda_i < 1 \forall i$. Ainsi on a $\lambda'_i(\alpha) = (\lambda_i - 1) < 0$. Toutes les fonctions $\lambda_i(\alpha)$ ont donc la même monotonie et valent toutes 1 en 0.

En outre, on vérifie aisément que si $\lambda_i \neq \lambda_j$, alors $\lambda_i(\alpha) \neq \lambda_j(\alpha) \forall \alpha \neq 0$.

Soit λ_I la valeur propre qui réalise $\max_i |\lambda_i|$. On voit facilement que tant que $\lambda_I(\alpha)$ réalise seule $\max_i |\lambda_i(\alpha)|$, on peut encore faire diminuer le rayon spectral. Et comme, $|\lambda_i(\alpha)| = |\lambda_j(\alpha)| \Rightarrow \lambda_i(\alpha) = -\lambda_j(\alpha)$, on voit que lorsque $\exists i \neq I$ tq $\lambda_i \neq \lambda_I$ et $|\lambda_I(\alpha)| = |\lambda_i(\alpha)|$, du fait que les monotonies sont identiques, on ne peut plus minimiser à la fois $|\lambda_I(\alpha)|$ et $|\lambda_i(\alpha)|$. L'optimum est donc atteint. On remarque notamment que, comme on a $\lambda_i(\alpha) < 1 \forall \alpha > 0$, la convergence de l'algorithme est assurée à l'optimum.

$$\lambda_i(\alpha) = -\lambda_j(\alpha) \text{ nous donne : } \alpha = \frac{1}{1 - \frac{\lambda_i + \lambda_j}{2}}.$$

De plus, comme les $\lambda_i(\alpha)$ ne peuvent se croiser, et que λ_I correspond soit au minimum, soit au maximum des valeurs propres, le premier $\lambda_i \neq \lambda_I$ qui réalise $|\lambda_I(\alpha)| = |\lambda_i(\alpha)|$, est soit le maximum (si λ_I est le minimum), soit le minimum des valeurs propres.

La relaxation optimale, dont on a vu qu'elle assurait la convergence, est donc :

$$\alpha = \frac{1}{1 - \frac{\max_i \lambda_i + \min_i \lambda_i}{2}}.$$

Comme dans le cas à une dimension, la relaxation optimale que nous avons dégagée nécessite de connaître des propriétés de f en la solution du problème. Il faudra donc généralement utiliser des méthodes approchées.

Un procédé empirique très simple, qui fonctionne quelle que soit la dimension du problème, donne souvent de bons résultats. Il consiste à diviser la relaxation par deux à chaque fois que le critère de convergence croît (attention à sa définition). Il est possible, mais pas indispensable, de recalculer les itérations où le critère de convergence a crû.

3.2.6 Accélération du point fixe

L'accélération de la convergence de méthodes de type point fixe est domaine à part entière de l'analyse numérique. La littérature sur ce sujet est vaste, et on peut citer par exemple, comme point d'entrée, les communications de Brezinski [17] [18]. Nous nous contentons de lister ici quelques méthodes incontournables.

a. A une dimension : méthode Δ^2 d'Aitken

On a vu qu'il était possible d'améliorer la convergence du point fixe en introduisant une relaxation. Dans tous les cas, $\alpha = \frac{1}{1 - f'(x_{sol})}$ est la relaxation optimale à une dimension. En posant $k = f'(x_{sol})$, on voit que la fonction g obtenue après relaxation s'écrit :

$$g(x) = \frac{f(x) - kx}{1 - k}.$$

L'accélération d'Aitken consiste à estimer la valeur de k grâce aux résultats des dernières itérations. En effet, on a :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{x^{(n+2)} - x^{(n+1)}}{x^{(n+1)} - x^{(n)}} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{f(x^{(n+1)}) - f(x^{(n)})}{x^{(n+1)} - x^{(n)}} = f'(x_{sol}) = k.$$

On pose donc $k_n = \frac{x^{(n+2)} - x^{(n+1)}}{x^{(n+1)} - x^{(n)}}$, que l'on injecte dans $\tilde{x}^{(n+2)} = \frac{x^{(n+2)} - k_n x^{(n+1)}}{1 - k_n}$.

Le processus que l'on en déduit (appelé méthode de Steffensen ou de Aitken-Steffensen) est le suivant : on suppose que l'on commence à l'itération n avec $x^{(n)}$.

On calcule tout d'abord deux itérations classiques du point fixe : $x^{(n+1)} = f(x^{(n)})$ et $x^{(n+2)} = f(x^{(n+1)})$.

On pose ensuite $\tilde{x}^{(n+2)} = x^{(n)} - \frac{(\Delta x^{(n)})^2}{\Delta^2 x^{(n)}} = x^{(n)} - \frac{(x^{(n+1)} - x^{(n)})^2}{x^{(n+2)} - 2x^{(n+1)} + x^{(n)}}$ (forme équivalente à la précédente qui a donné son nom à la méthode), et on itère le processus en repartant de $\tilde{x}^{(n+2)}$.

Notons que pour des raisons de précision numérique, on préfère l'écriture équivalente :

$$\tilde{x}^{(n+2)} = x^{(n+1)} + \frac{1}{\frac{1}{x^{(n+2)} - x^{(n+1)}} - \frac{1}{x^{(n+1)} - x^{(n)}}}.$$

C'est un procédé générique bien connu d'accélération de la résolution du point fixe. Il a été testé dans le cadre d'un couplage neutronique-thermohydraulique très simplifié dans [98].

Notons que cette méthode permet d'accélérer la convergence de toute suite réelle pourvue que $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{x^{(n+2)} - x^{(n+1)}}{x^{(n+1)} - x^{(n)}} = k$ avec $|k| < 1$. Plus de détails à propos des méthodes d'accélération à une dimension peuvent être trouvés dans [46] ou dans [17].

b. A plus d'une dimension : accélération de Chebyshev

Il est possible d'utiliser les polynômes de Chebyshev pour accélérer la convergence de l'algorithme de Gauss-Seidel (mais les formulations trouvées dans la littérature supposent que le problème est linéaire). Une présentation détaillée de cette méthode ne sera pas donnée ici, mais peut être trouvée par exemple dans [5].

c. A plus d'une dimension : accélération d'Anderson

La méthode, issue des travaux d'Anderson [3], consiste à exprimer $x^{(n+1)}$ (n est le numéro d'itération) comme une combinaison linéaire des dernières observations de f :

$$x^{(n+1)} = \sum_{i=0}^m \alpha_i f(x^{(n-i)}),$$

avec les α_i qui minimisent $\left\| \sum_{i=0}^m \alpha_i (f(x^{(n-i)}) - x^{(n-1)}) \right\|_2$, sous la contrainte $\sum_{i=0}^m \alpha_i = 1$. m est un paramètre de la méthode.

Pour comprendre la méthode, on peut voir que cela revient, lorsque f est linéaire, à chercher $x_{min} = \sum_{i=0}^m \alpha_i x^{(n-i)}$ qui minimise la norme du résidu $f(x_{min}) - x_{min}$, dans le sous-espace affine contenant $\{x^{(n-m)}, \dots, x^{(n)}\}$. L'hypothèse de linéarité est d'autant mieux vérifiée que l'on s'approche de la solution, ce qui permet de "sentir" la convergence de la méthode. On peut noter au passage qu'il n'y a pas beaucoup de sens à choisir m plus grand que la dimension de l'espace où vit x , et que le résultat de la minimisation ne sera alors pas unique.

[125] explique clairement la méthode d'un point de vue mathématique et donne des conseils pratiques pour sa mise en œuvre. Elle a été testée récemment sur un cas de couplage 1D simplifié entre neutronique et thermohydraulique dans [121]. Il est intéressant de constater qu'il a été obtenu des résultats sensiblement meilleurs qu'avec un algorithme de Gauss-Seidel utilisant une relaxation optimale.

3.2.7 Itérations de Jacobi

La méthode de Jacobi est similaire à celle de Gauss-Seidel. La différence est qu'on n'utilise pas le résultat du calcul précédent pour améliorer celui du suivant. Cela revient à itérer ainsi (n est le numéro d'itération) :

$$\begin{cases} x_1^{(n+1)} = f_1(x_1^{(n)}, x_2^{(n)}) \\ x_2^{(n+1)} = f_2(x_1^{(n)}, x_2^{(n)}) \end{cases}$$

On voit que c'est aussi une méthode de type point fixe. La convergence est plus lente que pour Gauss-Seidel, mais l'algorithme est parallélisable. La méthode de Gauss-Seidel est généralement privilégiée à celle de Jacobi.

3.2.8 Conclusion

La méthode de Gauss-Seidel est facile à mettre en place et converge souvent. Notamment, la convergence a lieu quelle que soit l'initialisation si le couplage est suffisamment faible. Cependant, la méthode ne peut pas converger si les couplages mis en jeu sont trop violents. Ajouter une relaxation peut être une solution dans ce cas-là, mais la difficulté est alors de la paramétrer.

En outre, la convergence est linéaire (cf (3.5)) et est d'autant plus rapide que les fonctions étudiées sont faiblement couplées.

3.3 Méthode de Newton

3.3.1 Présentation de la méthode

Il s'agit d'une autre méthode courante, qui a de nombreuses variantes. Dans son formalisme initial, c'est une méthode de couplage intriqué (et donc ferme). Posons le système à résoudre ainsi (F_1 et F_2 peuvent être issus de la formulation (3.3) par exemple) :

$$F(x) = \begin{pmatrix} F_1(x_1, x_2) \\ F_2(x_1, x_2) \end{pmatrix} = 0, \quad x = (x_1, x_2).$$

On rappelle que, en général, x_i et $F_i(x_i, x_j)$ sont des vecteurs de \mathbb{R}^{d_i} .

On note $d(= d_1 + d_2)$ le nombre de composantes de x et on définit la jacobienne J_x du système en x comme suit (les F_i sont ici et pour la suite les composantes de F , et donc $F_i(x) \in \mathbb{R}$) :

$$J_x = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1}(x) & \cdots & \frac{\partial F_1}{\partial x_d}(x) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_d}{\partial x_1}(x) & \cdots & \frac{\partial F_d}{\partial x_d}(x) \end{pmatrix}$$

Comme la méthode de Gauss-Seidel, la méthode de Newton est itérative. Notons ici encore avec un exposant n l'indice d'itération. A partir d'une donnée initiale $x^{(0)}$ on itère ainsi :

1. On résout en δx le système linéaire : $J_{x^{(n)}}\delta x = -F(x^{(n)})$.
2. On pose $x^{(n+1)} = x^{(n)} + \delta x$.

On s'arrête généralement lorsque $\|\delta x\|$ ou $\|F(x^{(n)})\|$ devient suffisamment petit.

Comme précédemment, on voit que la méthode ne peut converger que vers une solution du problème.

3.3.2 Etude de la méthode

La méthode se base sur un développement de Taylor à l'ordre 1 autour de la solution x_{sol} :

$$F(x_{sol}) = 0 \approx F(x^{(n)}) + J_{x^{(n)}}(x_{sol} - x^{(n)}).$$

En supposant F suffisamment régulière, utilisons l'inégalité de Taylor-Lagrange pour quantifier l'erreur commise. Comme précédemment, on note D^2F_x l'application linéaire de \mathbb{R}^d dans $\mathcal{L}(\mathbb{R}^d)$, telle que $(D^2F_x ab)_k = \sum_{i,j} \frac{\partial^2 F_k(x)}{\partial x_i \partial x_j} a_i b_j$. S'il existe un réel M tel que $\|D^2F_{x^{(n)}+t(x_{sol}-x^{(n)})}\| \leq M \forall t \in]0, 1[$ alors :

$$\| -F(x^{(n)}) - J_{x^{(n)}}(x_{sol} - x^{(n)}) \| \leq \frac{M\|x_{sol} - x^{(n)}\|^2}{2},$$

Puisque $F(x_{sol}) = 0$. On introduit le vecteur η_n , de norme inférieure à 1, tel que :

$$F(x^{(n)}) = -J_{x^{(n)}}(x_{sol} - x^{(n)}) + \eta_n \frac{M\|x_{sol} - x^{(n)}\|^2}{2}.$$

On peut donc écrire la norme de l'erreur ainsi, en supposant la jacobienne inversible :

$$\begin{aligned} \|\varepsilon^{(n+1)}\| &= \|x^{(n+1)} - x_{sol}\| = \|x^{(n)} - J_{x^{(n)}}^{-1}F(x^{(n)}) - x_{sol}\| \\ \|\varepsilon^{(n+1)}\| &= \left\| x^{(n)} - J_{x^{(n)}}^{-1} \left(-J_{x^{(n)}}(x_{sol} - x^{(n)}) + \eta_n \frac{M\|x_{sol} - x^{(n)}\|^2}{2} \right) - x_{sol} \right\| \\ \|\varepsilon^{(n+1)}\| &= \|J_{x^{(n)}}^{-1}\eta_n\| \frac{M\|\varepsilon^{(n)}\|^2}{2} \leq \|J_{x^{(n)}}^{-1}\| \frac{M\|\varepsilon^{(n)}\|^2}{2}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Notons $K = \max_{x \in B(x_{sol}, \|x_{sol} - x^{(0)}\|)} \left(\frac{1}{2} \|J_x^{-1}\| \|D^2F_x\| \right)$. $B(x_{sol}, \|x_{sol} - x^{(0)}\|)$ est la boule de centre x_{sol} et de rayon $\|x_{sol} - x^{(0)}\|$. On a convergence si le critère suivant est respecté :

$$K\|x^{(0)} - x_{sol}\| < 1.$$

En outre, on peut montrer par récurrence que l'on a :

$$\|\varepsilon^{(n)}\| \leq \frac{(K\|x^{(0)} - x_{sol}\|)^{2^n}}{K}. \quad (3.7)$$

Cela nous montre qu'on a une convergence quadratique, donc plus rapide que celle de Gauss-Seidel, si l'initialisation est suffisamment bonne.

Il est clair que l'algorithme de Newton ne se définit correctement que si on peut définir la jacobienne de F en tous points. Il arrive cependant que les phénomènes que l'on étudie introduisent des ruptures de pente. Nous pensons notamment aux changements de phase. Dans ce cas-là, [53] nous assure que la convergence de l'algorithme a toujours lieu, pour une initialisation suffisamment bonne, que l'on choisisse les dérivées partielles à droite ou à gauche aux ruptures de pente.

3.3.3 Variante avec relaxation

De la même façon que l'on avait introduit une relaxation pour Gauss-Seidel, il est possible d'en définir une pour Newton, que l'on notera $\alpha \in]0, 1]$ et qui intervient ainsi (δx est toujours calculé de la même façon) :

$$x^{(n+1)} = x^{(n)} + \alpha \delta x.$$

On voit facilement que lorsque $\alpha \neq 1$ on perd la vitesse de convergence quadratique de l'algorithme de Newton. La relaxation ne peut donc pas être utilisée pour accélérer la convergence, mais peut permettre de converger dans certaines situations où l'algorithme initial ne l'aurait pas fait. La jacobienne est alors principalement utilisée pour déterminer la direction dans laquelle on fait évoluer $x^{(n)}$ et α détermine la taille du « pas » effectué. Dans le principe, on voit qu'on se rapproche d'un algorithme de type descente de gradient, utilisé pour les problèmes d'optimisation [71].

Insistons sur le fait que $\alpha = 1$ sera toujours optimum quand on s'approche de la solution pour l'algorithme de Newton, ce qui n'était pas le cas pour Gauss-Seidel. Quand on utilise une relaxation avec l'algorithme de Newton, il faut donc avoir la possibilité, à chaque itération, d'augmenter α .

Comme pour Gauss-Seidel, il y a un procédé empirique simple pour utiliser la relaxation avec la méthode de Newton. Il faut pour cela rajouter un niveau d'itération interne. Chaque itération de Newton commence avec $\alpha = 1$. On recalcule ensuite cette itération en divisant la relaxation par deux à chaque fois, tant que le résidu obtenu n'est pas plus petit que celui de l'itération précédente.

3.3.4 Algorithme de Newton inexact

Il s'agit simplement d'un algorithme de Newton dans lequel on admet que la résolution du système $J_{x^{(n)}} \delta x = -F(x^{(n)})$ ne soit pas exacte.

Partant d'une donnée initiale $x^{(0)}$, on itère ainsi :

1. On détermine δx qui vérifie : $\|J_{x^{(n)}} \delta x + F(x^{(n)})\| \leq \eta^{(n)} \|F(x^{(n)})\|$.
2. On pose $x^{(n+1)} = x^{(n)} + \alpha^{(n)} \delta x$.

$\eta^{(n)} \in [0, 1]$ fixe la précision demandée sur la résolution du système linéaire et $\alpha^{(n)} > 0$ correspond à une relaxation comme on l'a déjà introduite au paragraphe 3.3.3. La résolution du système linéaire étant supposée inexacte, l'algorithme ne bénéficie pas de la vitesse de convergence quadratique du Newton, et l'introduction de la relaxation est moins gênante.

3.3.5 Conclusion

Le critère de convergence de la méthode de Newton est très différent de celui du point fixe, puisqu'il dépend de la qualité de l'initialisation et pas uniquement de propriétés de la fonction dont on cherche le 0. Ainsi, la méthode peut théoriquement s'appliquer à n'importe quel cas, pourvu qu'on l'initialise assez bien. Cela vient de l'idée que n'importe quelle fonction dérivable peut être approximée par un développement de Taylor à l'ordre 1 à petite échelle.

Dans les faits, si la condition d'initialisation est trop sévère, la méthode ne peut pas être utilisée puisque trouver une bonne initialisation revient à donner une bonne approximation de la solution, ce qu'est justement censée fournir la méthode.

L'intervention de $\|D^2 f_x\|$ dans le critère de convergence nous indique que la méthode fonctionne mal sur les fonctions « bruitées », comme on peut en rencontrer à cause d'erreurs numériques ou de convergences imparfaites.

Quand on compare les critères des deux méthodes, on voit que :

- La méthode de Newton n'est pas directement affectée par la force du couplage, contrairement à Gauss-Seidel.
- Gauss-Seidel est plus adaptée pour les fonctions bruitées.
- Il existe des cas où aucune des deux méthodes n'est utilisable.

Notons enfin que la méthode de Newton a une convergence plus rapide en nombre d'itérations (quadratique contre linéaire).

La mise en œuvre de la méthode est cependant difficile, puisqu'il faut calculer la jacobienne de notre problème puis résoudre un système linéaire. En outre, dans le cadre d'un couplage, non seulement la jacobienne peut être trop grosse pour être stockée (si les codes échangent des champs 3D par exemple), mais est souvent presque impossible à évaluer directement.

La méthode *Jacobian-Free Newton-Krylov* (JFNK) est une façon de mettre en œuvre la méthode de Newton qui contourne les difficultés que nous venons de citer.

3.4 Méthode JFNK (Jacobian-Free Newton-Krylov)

3.4.1 Présentation de la méthode

Une discussion complète sur la méthode JFNK peut être trouvée dans [58]. Elle est également assez bien détaillée dans [78]. Elle est notamment à la base de la plateforme de couplage MOOSE [40]. Le JFNK est une mise en œuvre de la méthode de Newton qui s'appuie sur une méthode de Krylov pour la résolution de systèmes linéaires, que l'on appliquera à chaque itération de Newton au système $J_{x(n)} \delta x = -F(x^{(n)})$. Les méthodes de Krylov ont l'avantage de ne faire intervenir la matrice du système qu'à travers des produits matrice-vecteur, que l'on est capable d'approximer par simples appels des codes. La méthode JFNK permet donc de définir une technique de couplage séquentielle (les codes sont conservés) mais ferme, à partir de l'algorithme de Newton. Nous y reviendrons section 3.4.2. La méthode *Generalized Minimal RESidual method* (GMRES), que nous allons présenter, est la méthode de Krylov généralement utilisée dans un JFNK.

La résolution du système linéaire est rarement poussée jusqu'au bout, pour des raisons de temps de calcul, et c'est ainsi plutôt un algorithme de Newton inexact qui est utilisé.

a. Principe des méthodes de Krylov pour résoudre $Ax = b$

Notons m la dimension du vecteur b . Les méthodes de Krylov consistent à rechercher une approximation de la solution sur un espace vectoriel K_n de dimension réduite $n \leq m$, que l'on construit ainsi : $K_n = Vect(r_0, Ar_0, \dots, A^{n-1}r_0)$, où $r_0 = b - Ax_0$, avec x_0 une estimation initiale de la solution du système linéaire. Dans notre cas x_0 est généralement pris nul et on a simplement $r_0 = b$. Pour simplifier les écritures nous travaillerons dans la suite directement avec la variable b . Notons que $(b, Ab, \dots, A^{n-1}b)$ ne forme pas forcément une famille de vecteurs libres, mais que si ce n'est pas le cas, la solution x peut être générée par la famille $(b, Ab, \dots, A^{n-2}b)$. Démontrons cette propriété qui est une façon de comprendre la construction des méthodes de Krylov.

Démonstration :

Supposons que $(b, Ab, \dots, A^p b)$ avec $p \leq m$ ne soit pas libre. Cela signifie qu'il existe une combinaison linéaire non nulle des vecteurs de la famille qui soit nulle. On l'écrit : $\exists (C_i)_{0 \leq i \leq p}$ non tous nuls tels que $\sum_{i=0}^p C_i A^i b = 0$.

Distinguons deux cas :

1. Soit $C_0 \neq 0$, et donc $b = -\sum_{i=1}^p \frac{C_i}{C_0} A^i b = A(-\sum_{i=0}^{p-1} \frac{C_{i+1}}{C_0} A^i b)$. On a donc bien trouvé une combinaison linéaire des vecteurs $(b, Ab, \dots, A^{p-1}b)$ solution du problème $Ax=b$.
2. Soit $C_0 = 0$, et dans ce cas on a $A(\sum_{i=0}^{p-1} C_{i+1} A^i b) = 0$. Si A est inversible, on en déduit que $\sum_{i=0}^{p-1} C_{i+1} A^i b = 0$, ce qui nous ramène au cas précédent par récurrence, l'un des C_i étant non nul. ■

Ainsi, il n'y a pas d'intérêt à considérer K_n si sa dimension n'est pas n . Introduisons donc $(q_i)_{0 \leq i \leq n}$ vecteurs de \mathbb{R}^m formant une base de K_n . Notons Q_n la matrice (de dimension $m \times n$) composée des vecteurs colonnes (q_i) . Q_n est la matrice de passage de la base canonique à la base constituée des (q_i) : soit $x_n \in K_n$ exprimé dans la base canonique de \mathbb{R}^m , y_n tel que $x_n = Q_n y_n$, sont les coordonnées de x_n dans (q_i) .

Il y a plusieurs façons de construire la base $(q_i)_{0 \leq i \leq n}$. Pour des raisons de stabilité on utilise généralement une base orthonormale que l'on construit avec le procédé de Gram-Schmidt, appelé dans ce cas méthode d'Arnoldi.

Notons que Q_n est donc orthogonale et que la transposée d'une matrice de passage orthogonale est la matrice de passage inverse, ce qui s'écrit ${}^t Q_n Q_n = I_n$ ou $Q_n {}^t Q_n = I_n$.

b. Méthode d'Arnoldi pour construire la base orthonormale

On construit la base par récurrence, le premier vecteur étant bien sûr $q_1 = \frac{b}{\|b\|}$. Le $n+1$ ème vecteur se construit ainsi, étant donnés les précédents :

1. $q_{n+1} \leftarrow Aq_n$
2. pour $i = 1 \dots n$:
 - (a) $h_{i,n} \leftarrow {}^t q_i q_{n+1}$
 - (b) $q_{n+1} \leftarrow q_{n+1} - h_{i,n} q_i$
3. $h_{n+1,n} \leftarrow \|q_{n+1}\|$
4. $q_{n+1} \leftarrow \frac{q_{n+1}}{h_{n+1,n}}$

On mémorise les scalaires $h_{i,j}$ calculés pendant le processus qui permettent de définir la matrice $H_n = (h_{i,j})_{i \leq n; j \leq n}$ telle que $H_n = {}^t Q_n A Q_n$. Les éléments de H_n au-dessous de la première sous-diagonale ne sont pas calculés et sont pris nuls, ce qui fait de H_n une matrice dite de Hessenberg, ce qui simplifiera la suite.

On définit aussi la matrice \tilde{H}_n en rajoutant à H_n une ligne de 0, sauf sur la dernière colonne où on met $h_{n+1,n}$, c'est-à-dire que $\tilde{H}_n = \begin{pmatrix} H_n \\ h_{n+1,n}({}^t e_n) \end{pmatrix}$ où e_n est la n -ième colonne de I_n . \tilde{H}_n est aussi une matrice de Hessenberg. Pour fixer les idées, explicitons \tilde{H}_n :

$$\tilde{H}_n = \begin{pmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} & \dots & h_{1,n} \\ h_{2,1} & \ddots & & h_{2,n} \\ 0 & \ddots & h_{n-1,n-1} & \vdots \\ \vdots & & h_{n,n-1} & h_{n,n} \\ 0 & \dots & 0 & h_{n+1,n} \end{pmatrix}.$$

Par construction nous avons $\tilde{H}_n = {}^t Q_{n+1} A Q_n$.

c. La méthode GMRES

Développons à partir de la dernière égalité. En utilisant que Q_{n+1} est une matrice de passage, on obtient :

$$A Q_n = Q_{n+1} \tilde{H}_n.$$

On multiplie par y_n un vecteur quelconque de \mathbb{R}^n :

$$A Q_n y_n = Q_{n+1} \tilde{H}_n y_n.$$

En interprétant y_n comme un vecteur de K_n exprimé dans la base des (q_i) , $x_n = Q_n y_n$ devient les coordonnées de y_n dans la base canonique de \mathbb{R}^m . En retranchant b et en remarquant que dans la base des (q_i) il s'écrit $\|b\|q_1$, on obtient :

$$A x_n - b = Q_{n+1} (\tilde{H}_n y_n - \|b\|q_1).$$

On passe maintenant à une norme invariante pour les transformations orthogonales (la norme L_2 par exemple) :

$$\|Ax_n - b\| = \|\tilde{H}_n y_n - \|b\|q_1\|.$$

Ainsi, pour trouver le vecteur x_n de K_n exprimé dans la base canonique de \mathbb{R}^m qui minimise la norme du résidu, il suffit de trouver $y_n \in \mathbb{R}^n$ qui minimise $\|\tilde{H}_n y_n - \|b\|q_1\|$ (on a n inconnues pour $n + 1$ équations) puis de faire le changement de base $x_n = Q_n y_n$.

Pour résoudre ce problème de minimisation, on calcule la décomposition QR de \tilde{H}_n , c'est-à-dire qu'on cherche les matrices O_n et R_n telles que ${}^t O_n \tilde{H}_n = R_n$ avec O_n orthogonale et R_n triangulaire supérieure. Le problème se ramène alors à la minimisation de $\|R_n y_n - \|b\|{}^t O_n q_1\|$.

La décomposition QR doit se calculer en même temps que la fabrication de la matrice \tilde{H}_n avec la méthode d'Arnoldi.

Supposons que l'on ait déjà calculé O_{n-1} et R_{n-1} . On note O_{n-1}^p la matrice O_{n-1} prolongée avec une ligne et une colonne de 0 et un 1 sur leur intersection. Ainsi, ${}^t O_{n-1}^p \tilde{H}_n$ est de la forme :

$$\begin{pmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & \cdots & x_{1,n} \\ 0 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & x_{n-1,n-1} & x_{n-1,n} \\ & & 0 & r \\ 0 & \cdots & 0 & h \end{pmatrix}.$$

On multiplie (à gauche) par la matrice de rotation (qui est orthogonale et de dimension $(n+1)^2$) suivante (avec $c = \frac{r}{\sqrt{r^2 + h^2}}$ et $s = -\frac{h}{\sqrt{r^2 + h^2}}$) :

$$Rot_n = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & & c & -s \\ & & & s & c \end{pmatrix}.$$

On obtient bien une matrice triangulaire supérieure, la matrice R_n que l'on cherchait. O_n est le produit $O_{n-1}^p {}^t Rot_n$.

Le processus à appliquer à chaque itération pour calculer R_n et le second membre $\|b\|{}^t O_n q_1$ est le suivant (pour la première itération, il n'y a pas de rotation précédemment calculée donc ${}^t O_0^p = Id$ et R_0 n'existe pas, on a donc directement $R_1 = Rot_1(h_{i,1})_{i \leq 2}$) :

- On applique les rotations précédemment calculées (${}^t O_{n-1}^p$) au vecteur $(h_{i,n})_{i \leq n+1}$.
- On calcule la rotation Rot_n qui permet d'annuler la dernière composante du vecteur que l'on vient de calculer.
- On calcule R_n en ajoutant à R_{n-1} une colonne égale au produit ${}^t O_{n-1}^p (h_{i,n})_{i \leq n+1}$, en complétant la $n+1$ -ième ligne par des 0, et en appliquant Rot_n au résultat.
- On met à jour le second membre en appliquant Rot_n à celui obtenu à l'itération précédente, $\|b\|{}^t O_{n-1}^p q_1$.

La matrice R_n obtenue est triangulaire supérieure, mais, comme \tilde{H}_n , de dimension $(n+1)*n$. Sa dernière ligne est donc nulle. Notons R'_n la matrice triangulaire carrée, obtenue en enlevant la dernière ligne de R_n . De même, notons $(\|b\|^t O_n q_1)'$ le vecteur obtenu en enlevant la dernière composante de $\|b\|^t O_n q_1$.

La minimisation de $\|R_n y_n - \|b\|^t O_n q_1\|$ se fait en résolvant le système linéaire triangulaire $R'_n y_n = (\|b\|^t O_n q_1)'$. La norme du résidu du problème de minimisation est alors égale à la valeur absolue de la dernière composante de $\|b\|^t O_n q_1$.

3.4.2 Utilisation et intérêt de la méthode JFNK dans le cadre d'un couplage

Dans la méthode GMRES de résolution de systèmes linéaires que nous venons de présenter, la matrice du problème n'intervient qu'à travers un produit matrice-vecteur, dans l'algorithme d'Arnoldi. Notre problème faisant intervenir une jacobienne, on peut utiliser le développement de Taylor suivant pour approximer le produit matrice-vecteur :

$$J_u v = \frac{F(u + \varepsilon v) - F(u)}{\varepsilon} + O(\varepsilon).$$

Une évaluation de F correspond à un appel aux codes que l'on couple. La méthode peut donc s'utiliser sans que l'on ait besoin de calculer ou de stocker la jacobienne de notre problème couplé, mais demande un appel fréquent aux codes. On a ainsi besoin d'un appel des codes par itération GMRES, en plus de l'appel nécessaire par itération de Newton.

On voit que notre approximation du produit $J_u v$ introduit une erreur en $O(\varepsilon)$. On peut réduire cette erreur en utilisant une différence centrée, mais on a alors besoin de deux appels des codes par itération de GMRES.

$$J_u v = \frac{F(u + \varepsilon v) - F(u - \varepsilon v)}{2\varepsilon} + O(\varepsilon^2).$$

Insistons sur le fait que le JFNK n'est qu'une façon de mettre en œuvre l'algorithme de Newton en contournant les difficultés liées à la construction de la jacobienne. La discussion à propos de la méthode de Newton s'applique donc ici. Le JFNK introduit de nouveaux paramètres que sont le ε servant à calculer le produit Jv et le critère de convergence de la méthode GMRES. Le premier doit être choisi suffisamment petit pour que le développement de Taylor soit le plus juste possible, mais suffisamment grand pour s'affranchir du bruit numérique. Le critère de convergence du GMRES est, quant à lui, un compromis entre précision et temps de calcul.

3.4.3 BiCGStab, une alternative à la méthode GMRES

La méthode GMRES présentée ici, qui se base sur l'orthogonalité de la base de K_n obtenue par la méthode d'Arnoldi, a pour principaux inconvénients la nécessité de stocker la base construite, et le coût croissant de chaque itération. On peut éviter ces désavantages en acceptant de ne pas conserver la propriété d'orthogonalisation de la base. Parmi les méthodes permettant de le faire, *BiConjugate Gradient Stabilized method* (BiCGStab) [123] est peut-être la plus répandue.

3.5 Méthode JFNK préconditionnée

3.5.1 Notion de conditionnement

On reprend ici la présentation de [71]. Les démonstrations des résultats donnés ici pourront y être trouvées. On appelle conditionnement d'une matrice A la quantité définie ainsi :

$$\kappa(A) = \|A\| \|A^{-1}\|.$$

On considère les trois systèmes linéaires ci-dessous :

$$Ax = b$$

$$A(x + \delta x) = b + \delta b$$

$$(A + \delta A)(x + \delta x') = b.$$

On a alors les deux inégalités suivantes :

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \kappa(A) \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$$

$$\frac{\|\delta x'\|}{\|x + \delta x'\|} \leq \kappa(A) \frac{\|\delta A\|}{\|A\|}.$$

Ce qui signifie que le conditionnement nous donne une borne de la variation de la solution d'un système linéaire à une perturbation de la matrice ou du second membre. En outre, cette borne est la meilleure possible : on peut choisir b et δb ou b et δA tels que les inégalités précédentes soient des égalités. Les simulations informatiques étant toujours entachées d'erreurs numériques, on comprend la nécessité d'avoir un conditionnement le plus petit possible. Notamment, pour le JFNK, puisqu'on résout le système linéaire en l'approchant par projections, meilleur sera le conditionnement, moins on aura besoin d'itérations de Krylov pour obtenir une bonne approximation de la solution du système linéaire que l'on cherche à résoudre.

Si on travaille avec la norme L^2 , on a la formule suivante, qui permet un calcul du conditionnement sans avoir à connaître A^{-1} :

$$\kappa_2(A) = \sqrt{\frac{\max_i |\lambda_i(A^t A)|}{\min_i |\lambda_i(A^t A)|}} \geq 1.$$

3.5.2 Généralités sur le preconditionnement

Le preconditionnement consiste à transformer le système linéaire à résoudre en un autre, de même solution, mieux conditionné. On introduit pour cela une matrice P inversible. On parle de conditionnement à gauche lorsqu'on résout le système linéaire suivant :

$$PP^{-1}Ax = b,$$

Et de conditionnement à droite lorsqu'il s'agit de celui-ci :

$$AP^{-1}Px = b.$$

Dans le premier cas on résout $P^{-1}Ax = P^{-1}b$. Dans le deuxième cas on résout $AP^{-1}y = b$, puis on en déduit $x = P^{-1}y$.

Dans les deux cas, on voit que le conditionnement est optimal si $P = A$. On cherche donc généralement une matrice de conditionnement proche de A .

3.5.3 Application au JFNK

La littérature ([58], [75], [138], [24]) introduit généralement le préconditionnement à droite dans le cadre du JFNK (qui, contrairement au préconditionnement à gauche, ne modifie pas le second membre du système linéaire dont la norme sert généralement à évaluer la convergence de la méthode). L'itération de Newton devient donc :

1. $(J_{x^{(n)}}P^{-1})\delta u = -F(x^{(n)})$
2. $x^{(n+1)} = x^{(n)} + P^{-1}\delta u.$

Lors de la résolution du système linéaire avec une méthode de Krylov, il faut donc pouvoir calculer le produit de $J_{x^{(n)}}P^{-1}$ avec un vecteur v , ce que l'on fait ainsi :

$$J_{x^{(n)}}P^{-1}v \approx \frac{F(u + \varepsilon P^{-1}v) - F(u)}{\varepsilon}.$$

Ainsi, si on sait appliquer P^{-1} à un vecteur donné il est facile d'utiliser un préconditionnement à droite dans JFNK. Il existe plusieurs méthodes de préconditionnement, mais, en partant du constat que si $P^{-1} \approx J_{x^n}^{-1}$ le conditionnement est bon, et que $\delta x = -J_{x^n}^{-1}F(x^n)$ permet de calculer l'incrément des variables sur une itération de Newton, on utilise souvent comme préconditionnement une méthode de résolution approchée qui, étant donné un résidu, est capable de donner une estimation de l'incrément δx que l'on cherche. On parle alors de « préconditionnement basé sur la physique ». Notons que cette méthode de résolution approchée, pendant la résolution de JFNK, ne sera pas appliquée à un résidu mais à un vecteur de l'espace de Krylov, puis à la solution du système linéaire.

Dans [98], il est mis en évidence, sur un cas de couplage unidimensionnel neutronique – thermohydraulique, une réduction d'un facteur environ 10 de la taille des espaces de Krylov nécessaires au JFNK par l'utilisation d'un préconditionnement basé sur la physique. La réduction en temps de calcul est encore supérieure, le nombre d'opérations à réaliser à chaque itération du GMRES augmentant avec la taille de l'espace de Krylov.

Ainsi l'utilisation d'un préconditionnement permet d'améliorer fortement les performances du JFNK. En outre, l'idée d'utiliser un solveur simplifié comme préconditionnement en rend l'utilisation relativement aisée.

3.6 Méthode ABN (Approximate Block Newton)

3.6.1 Présentation

La méthode de Newton permet d'annuler un résidu, c'est-à-dire de résoudre une équation du type $F(x) = 0$. On utilise donc classiquement l'écriture (3.3) du couplage quand on utilise l'algorithme de Newton. Il est cependant possible d'appliquer un algorithme de Newton sur l'écart entre deux itérations successives de Gauss-Seidel, et c'est ce que propose la méthode *Approximate Block Newton* (ABN), présentée dans [137]. Par rapport au Newton classique, on diminue la dimension de l'espace des inconnues.

On écrira les itérations de Gauss-Seidel ainsi :

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} = f_2(x_1^{(k+1)}, x_2^{(k)}). \end{cases}$$

k indique le numéro d'itération de l'algorithme.

La première étape est une itération de Gauss-Seidel :

$$\begin{aligned} x'_1 &= f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) \\ x'_2 &= f_2(x'_1, x_2^{(k)}). \end{aligned}$$

On définit ensuite le résidu, sur lequel l'algorithme de Newton va travailler, comme

$$r = x_2^{(k)} - x'_2.$$

On doit donc résoudre le système :

$$S\Delta x_2 = -r,$$

Avec $S = Id - \frac{\partial f_2(f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}), x_2^{(k)})}{\partial x_2}$. La résolution du système linéaire se fait en utilisant une méthode de Krylov, comme celle déjà présentée à propos du JFNK. Il suffit donc de savoir calculer le produit de S avec un vecteur w . On le fait ainsi :

$$\begin{aligned} p &= f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)} + \varepsilon w) \\ Sw &= w - \frac{1}{\varepsilon}(f_2(p, x_2^{(k)}) - x'_2). \end{aligned}$$

On remarque qu'on ne perturbe pas la dépendance de f_2 en x_2 , signe qu'on néglige sa contribution à la jacobienne du système.

Une fois Δx_2 déterminé, on met à jour les variables ainsi :

$$\begin{aligned} x_2^{(k+1)} &= x_2^{(k)} + \Delta x_2 \\ x_1^{(k+1)} &= f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k+1)}). \end{aligned}$$

Il ne reste plus qu'à itérer le processus.

3.6.2 Une variante : la méthode ABN-J.

Nous allons voir qu'avec une démarche différente nous obtenons un algorithme similaire au précédent. Ce nouvel algorithme est nommé *Approximate Block Newton-Jacobi* (ABN-J) car il commence par une itération de Jacobi plutôt que de Gauss-Seidel. Cette méthode est bien expliquée dans [137].

Nous allons partir de l'écriture (3.3) du couplage, pour écrire le pas de Newton classique :

$$\begin{bmatrix} \partial_1 F_1 & \partial_2 F_1 \\ \partial_1 F_2 & \partial_2 F_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} F_1(x_1, x_2) \\ F_2(x_1, x_2) \end{bmatrix}.$$

On a noté $\Delta x_i = x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}$ et $\partial_i = \frac{\partial}{\partial x_i}$. On ne notera pas dans la suite les indices k pour alléger les notations. Les termes en $\partial_i F_j$ sont toujours évalués en (x_1, x_2) , sauf mention contraire.

On utilise un préconditionnement à gauche du système linéaire, en utilisant l'inverse de la jacobienne par blocs des sous-problèmes :

$$\begin{bmatrix} \partial_1 F_1^{(-1)} & 0 \\ 0 & \partial_2 F_2^{(-1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \partial_1 F_1 & \partial_2 F_1 \\ \partial_1 F_2 & \partial_2 F_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \partial_1 F_1^{(-1)} & 0 \\ 0 & \partial_2 F_2^{(-1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_1(x_1, x_2) \\ F_2(x_1, x_2) \end{bmatrix}.$$

En faisant un pivot de Gauss, on se ramène à la forme suivante :

$$\begin{bmatrix} Id & C \\ 0 & S \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} q \\ r \end{bmatrix},$$

Avec $C = \partial_1 F_1^{-1} \partial_2 F_1$, $S = Id - \partial_2 F_2^{-1} \partial_1 F_2 C$, $q = \partial_1 F_1^{-1} F_1(x_1, x_2)$ et $r = \partial_2 F_2^{-1} F_2(x_1, x_2) - \partial_2 F_2^{-1} \partial_1 F_2 q$.

Il suffit alors de résoudre $S \Delta x_2 = -r$ et d'en déduire $\Delta x_1 = -q - C \Delta x_2$. Le système linéaire est résolu avec une méthode de Newton-Krylov. Il suffit donc de savoir multiplier S et C par un vecteur.

Pour cela on fait les approximations suivantes :

$$Cv = \partial_1 F_1^{-1} \partial_2 F_1 v \approx \frac{1}{\varepsilon} \partial_1 F_1^{-1} (F_1(x_1, x_2 + \varepsilon v) - F_1(x_1, x_2))$$

$$Sv = v - \partial_2 F_2^{-1} \partial_1 F_2 Cv \approx v + \frac{1}{\varepsilon} \partial_2 F_2^{-1} (F_2(x_1 - \varepsilon Cv, x_2) - F_2(x_1, x_2)).$$

De la même façon, en considérant que q est petit, on peut approximer r ainsi :

$$r = \partial_2 F_2^{-1} (F_2(x_1, x_2) - \partial_1 F_2 q) \approx \partial_2 F_2^{-1} (F_2(x_1 - q, x_2)).$$

On remarque que nous n'avons plus que des termes de la forme $\partial_i F_i^{-1} F_i(x, y)$. Si chaque code comporte des itérations globales de Newton, en écrivant $f_i^N(x_1, x_2)$ la nouvelle valeur de x_i après une itération de ce Newton interne initialisé en (x_1, x_2) , on remarque qu'on a :

$$\partial_i F_i^{-1} F_i(x_1, x_2) = x_i - f_i^{\mathcal{N}}(x_1, x_2).$$

Ce qui va nous permettre d'exprimer les termes précédents à l'aide des sorties des codes, en faisant les hypothèses :

$$\begin{aligned}\partial_1 F_1^{-1}(x_1, x_2) F_1(x_1, x_2 + \varepsilon v) &\approx \partial_1 F_1^{-1}(x_1, x_2 + \varepsilon v) F_1(x_1, x_2 + \varepsilon v), \\ \partial_2 F_2^{-1}(x_1, x_2) F_2(x_1 + \varepsilon v, x_2) &\approx \partial_2 F_2^{-1}(x_1 + \varepsilon v, x_2) F_2(x_1 + \varepsilon v, x_2).\end{aligned}$$

On obtient ainsi :

$$\begin{aligned}Cv &\approx \frac{1}{\varepsilon} (f_1^{\mathcal{N}}(x_1, x_2) - f_1^{\mathcal{N}}(x_1, x_2 + \varepsilon v)), \\ Sv &\approx v + \frac{1}{\varepsilon} (f_2^{\mathcal{N}}(x_1, x_2) - f_2^{\mathcal{N}}(x_1 - \varepsilon Cv, x_2)), \\ r &\approx x_2 - f_2^{\mathcal{N}}(x_1 - q, x_2), \\ q &= x_1 - f_1^{\mathcal{N}}(x_1, x_2).\end{aligned}$$

L'algorithme peut ainsi s'écrire en fonction des sorties des codes, mais dans ce formalisme ils doivent comporter un Newton global et il faut être capable de n'en faire qu'une itération. Dans [137] l'auteur remplace les $f_i^{\mathcal{N}}(x_1, x_2)$ par les sorties classiques des codes, que l'on a notées $f_i(x_1, x_2)$, en argumentant que, quitte à augmenter le nombre d'itérations internes, on peut toujours obtenir une convergence quadratique similaire à une itération de Newton. En menant le raisonnement jusqu'au bout, on remarque que si les solveurs sont convergés les f_i ne dépendent pas des x_i et que la question ne se pose pas, les termes $\partial_i F_i$ et $\partial_i F_i^{-1}$ étant égaux à l'identité (mais dans ce cas le préconditionnement que l'on fait ici est inutile).

Tout compte fait, l'algorithme se déroule comme suit :

On calcule q puis r :

$$\begin{aligned}q &= x_1 - f_1(x_1, x_2) \\ r &= x_2 - f_2(x_1 - q, x_2) = x_2 - f_2(f_1(x_1, x_2), x_2),\end{aligned}$$

On résout ensuite le système linéaire

$$S\Delta x_2 = -r,$$

avec une méthode de Newton-Krylov. Pour cela il faudra être capable de calculer le produit de S par un vecteur w , ce que l'on fait ainsi :

$$\begin{aligned}p &= f_1(x_1, x_2 + \varepsilon w) \\ Sw &= w - \frac{1}{\varepsilon} (f_2(x_1 - f_1(x_1, x_2) + p, x_2) - f_2(x_1, x_2)).\end{aligned}$$

Une fois Δx_2 déterminé, on met à jour les variables comme précédemment :

$$x_2^{(k+1)} = x_2^{(k)} + \Delta x_2$$

$$x_1^{(k+1)} = f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k+1)}).$$

L'algorithme a été écrit de façon à faire ressortir sa ressemblance avec la méthode ABN. On voit que la seule différence est dans le calcul de Sw où on a un écart de $x_1 - f_1(x_1, x_2)$ sur la première variable dans les deux appels de f_2 . Cet écart tend quadratiquement vers 0 lorsque la méthode converge, ce qui prouve bien leur équivalence.

3.6.3 Conclusion

Ces méthodes, qui s'appuient sur la même technique de résolution de systèmes linéaires que JFNK, sont des variantes à la méthode de Newton classique. Il est intéressant de voir que leur formalisme initial suppose que chacune des disciplines ne converge pas parfaitement. Ce fait n'est pas particulièrement exploité par la méthode ABN, qui peut se voir comme l'utilisation d'un Newton sur le résidu défini à partir d'une itération de Gauss-Seidel. Si un des deux codes est plus rapide d'exécution que l'autre, cette méthode permet donc d'en tirer parti pour diminuer la taille de l'espace dans lequel le Newton travaille.

La méthode ABN-J n'a, au contraire, d'intérêt que si on a effectivement une dépendance des F_i en les x_i , c'est-à-dire que si la convergence des codes est imparfaite. En particulier, son formalisme la rend naturelle entre deux codes utilisant un Newton global, que l'on pourrait limiter à une itération. Il n'a cependant pas été trouvé de littérature l'utilisant ainsi. C'est une piste pour la réalisation d'un intermédiaire entre un couplage séquentiel et un couplage intriqué.

3.7 Méthode ASPIN (*nonlinear Additive Schwarz Preconditioned Inexact Newton*)

La méthode *nonlinear Additive Schwarz Preconditioned Inexact Newton* (ASPIN) est introduite et présentée en détails dans [22]. Nous ne présentons ici que son principe, et renvoyons le lecteur à l'article mentionné pour plus d'éléments. Rappelons que le principe de l'algorithme de Newton inexact a déjà été présenté section 3.3.4.

3.7.1 Notion de préconditionnement non linéaire

Soit F une fonction non linéaire de \mathbb{R}^d dans \mathbb{R}^d . Supposons que l'on cherche à résoudre $F(x) = 0$. Un préconditionnement non linéaire consiste à résoudre plutôt $\mathcal{F}(x) = 0$, avec \mathcal{F} une fonction non linéaire de \mathbb{R}^d dans \mathbb{R}^d qui possède les mêmes racines que F .

Un cas simple est la composition : $\mathcal{F}(y) = G(F(y)) \forall y \in \mathbb{R}^d$. Dans ce cas, G ressemble à un préconditionnement comme introduit dans le cas linéaire paragraphe 3.5.2. Notons au passage que si G est une application linéaire, alors la jacobienne de G est G elle-même et que le système $\mathcal{F}'(x^{(n)})\delta x = \mathcal{F}(x^{(n)})$ se simplifie en $F'(x^{(n)})\delta x = F(x^{(n)})$ (on a noté ici avec un ' $'$ les jacobienes). Ainsi dans ce cas, on ne change pas la convergence de la méthode de Newton, mais on modifie simplement le conditionnement du système linéaire.

Le préconditionnement non linéaire est donc une généralisation du préconditionnement linéaire, qui va chercher non seulement à améliorer le conditionnement des systèmes linéaires à résoudre, mais aussi à accélérer la convergence de l'algorithme de Newton lui-même.

3.7.2 Préconditionnement additif de Schwarz non linéaire

Notons S l'ensemble des indices des composantes de $y \in \mathbb{R}^d$:

$$S = \{1, \dots, d\}.$$

Notons aussi S_1, \dots, S_N une partition de S dans le sens où :

$$\bigcup_{i=1}^N S_i = S \quad \text{et} \quad S_i \subset S \quad \forall i.$$

L'intersection des S_i peut ne pas être nulle. Notons V_i l'ensemble des vecteurs de \mathbb{R}^d dont les composantes v_k sont nulles si $k \notin S_i$. Il est aisé de voir que V_i est un espace vectoriel. Notons également I_{S_i} la matrice de dimension $d \times d$ dont la k -ième colonne est égale à celle de l'identité si $k \in S_i$, et est nulle sinon.

On peut maintenant définir la restriction à F au sous-domaine V_i ainsi :

$$F_{S_i} = I_{S_i} F.$$

Définissons maintenant la fonction T_i qui à $y \in \mathbb{R}^d$ associe $T_i(y) \in V_i$ tel que :

$$F_{S_i}(y - T_i(y)) = 0.$$

$T_i(y)$ est en quelque sorte l'écart de y , projeté sur V_i , à la solution de la restriction de notre problème.

Définissons enfin notre fonction \mathcal{F} preconditionnée non linéairement ainsi :

$$\mathcal{F}(y) = \sum_{i=1}^N T_i(y).$$

3.7.3 L'algorithme ASPIN

Notons \mathcal{J} la jacobienne de \mathcal{F} , J celle de F et J_{S_i} celle de $F_{S_i}|_{V_i}$. Sans démonstration, admettons que $\mathcal{J} = \sum_{i=1}^N J_{S_i}^{-1} J$ (pour définir la somme on "complète" les matrices J_{S_i} par des 0). Cette formule correspond au preconditionnement additif de Schwarz linéaire de J . Ainsi notre preconditionnement non linéaire améliore automatiquement le conditionnement de la jacobienne de notre problème.

L'algorithme est alors le suivant, à l'itération n :

1. Calcul du résidu $g^{(n)} = \mathcal{F}(x^{(n)})$:
 - (a) Pour $i \in \llbracket 1, N \rrbracket$, calcul de $g_i^{(n)} = T_i(x^{(n)})$ en résolvant les systèmes non linéaires réduits :

$$F_{S_i}(x^{(n)} - g_i^{(n)}) = 0.$$

(b) Formation du résidu global :

$$g^{(n)} = \sum_{i=1}^N g_i^{(n)}.$$

2. Détermination de l'incrément des variables δx qui vérifie :

$$\left\| \sum_{i=1}^N J_{S_i}^{-1} J \delta x + g^{(n)} \right\| \leq \eta^{(n)} \|g^{(n)}\|$$

pour $\eta^{(n)} \in [0, 1]$.

3. Mise à jour des variables avec

$$x^{(n+1)} = x^{(n)} + \alpha^{(n)} \delta x$$

et $\alpha^{(n)} > 0$.

Dans [22], il est annoncé que la jacobienne J n'a jamais besoin d'être formée, mais que sa multiplication par un vecteur est calculée avec les J_{S_i} qui, eux, sont formés. Il semblerait que ce soient plutôt les jacobienes des F_{S_i} , de dimensions différentes que les J_{S_i} , qui soient formées et qui servent à reconstruire la jacobienne globale J . L'idée suggérée dans [57] est de décomposer le domaine récursivement pour se ramener à un grand nombre de petits problèmes de Newton que l'on peut résoudre de manière exacte.

3.7.4 Utilisation dans un cas de couplage

Quand on réécrit le problème de couplage sous la forme suivante :

$$\begin{cases} F_1(x_1, x_2) = 0 \\ F_2(x_1, x_2) = 0, \end{cases}$$

une décomposition naturelle est S_i = l'ensemble des indices des composantes de x_i .

L'algorithme devient alors à l'itération n :

— Calcul du résidu $\Delta x = (\Delta x_1, \Delta x_2)$ qui vérifie :

$$\begin{cases} F_1(x_1^{(n)} + \Delta x_1, x_2^{(n)}) = 0 \\ F_2(x_1^{(n)}, x_2^{(n)} + \Delta x_2) = 0. \end{cases}$$

On pose alors :

$$\begin{cases} G_1(x_1^{(n)}, x_2^{(n)}) = \Delta x_1 \\ G_2(x_1^{(n)}, x_2^{(n)}) = \Delta x_2. \end{cases}$$

- Calcul de l'incrément des variables $\delta x = (\delta x_1, \delta x_2)$ en résolvant (de façon exacte ou non) :

$$G'_{x^{(n)}} \delta x = -\Delta x,$$

où $G'_{x^{(n)}}$ est la jacobienne du système des G_i évaluée en $(x_1^{(n)}, x_2^{(n)})$.

D'après ce qu'on a vu plus haut, la jacobienne $G'_{x^{(n)}}$ est de la forme :

$$G' = \begin{bmatrix} \frac{\partial G_1}{\partial x_1} & \frac{\partial G_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial G_2}{\partial x_1} & \frac{\partial G_2}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & \left(\frac{\partial F_1}{\partial x_1}\right)^{-1} \frac{\partial F_1}{\partial x_2} \\ \left(\frac{\partial F_2}{\partial x_2}\right)^{-1} \frac{\partial F_2}{\partial x_1} & I \end{bmatrix}.$$

Lorsque les codes sont convergés on a alors $F_i(x_1, x_2) = x_i - f_i(x_{j \neq i})$, d'où $\frac{\partial F_i}{\partial x_i} = I$. Le préconditionnement fait ici n'a donc pas d'effet dans ce cas. Remarquons qu'on avait déjà eu une conclusion du même type avec la méthode ABN-J paragraphe 3.6.2. L'algorithme présenté ici revient alors simplement à un algorithme de Newton.

Lorsque les codes ne sont pas convergés on a $F_i(x_1, x_2) = x_i - f_i(x_1, x_2)$. La détermination des résidus Δx_i revient alors à résoudre, en x_i , $x_i = f_i(x_1, x_2)$, c'est à dire à trouver la solution convergée de chacun des codes.

3.7.5 Conclusion

La méthode ASPIN revient à découper un problème en sous-problèmes de taille plus petite, qui se recouvrent éventuellement, à résoudre ces sous problèmes individuellement, puis à chercher la solution commune à l'aide d'une méthode de Newton.

Dans le cadre du formalisme classique du couplage, la méthode consiste, partant du formalisme (3.2), à résoudre chaque équation séparément pour se ramener au formalisme (3.1), puis à converger le couplage ainsi reformulé par un algorithme de Newton.

Il est intéressant de voir que bien qu'il puisse sembler efficace de chercher à converger les disciplines en même temps pour gagner en temps de calcul, converger chaque discipline indépendamment améliore à la fois la vitesse de convergence du Newton global et le conditionnement de la jacobienne qui y intervient. L'optimum se trouve donc probablement entre les deux, avec une convergence imparfaite des codes entre les itérations du coupleur. On retrouve ici un principe que l'on pouvait déjà sentir dans la présentation des méthodes de Newton par blocs, section 3.6. En effet, dans la méthode ABN on néglige à une étape de l'algorithme l'influence de la dépendance de f_2 en x_2 , et dans la méthode ABN-J, on demande une convergence des codes similaire à celle obtenue après une itération de Newton.

3.8 Méthodes de prédicteur-correcteur

3.8.1 Présentation

Il ne s'agit pas d'une méthode en soi, mais d'un type d'approche que nous évoquons parce qu'il revient souvent dans la littérature. Le principe est de chaîner deux méthodes de résolution. La première doit donner une approximation grossière de la quantité recherchée, tandis que la seconde raffine la solution.

3.8.2 Exemple

Nous avons déjà évoqué la possibilité de chaîner un Gauss-Seidel et un Newton, ce qui peut être vu comme un prédicteur-correcteur. La première méthode a une convergence lente mais sans condition sur l'initialisation, la seconde converge plus rapidement, mais a besoin d'une bonne initialisation, fournie par le Gauss-Seidel.

Les techniques de couplage en transitoire

4.1 Méthodes directement issues des techniques stationnaires

4.1.1 Equivalence avec le problème stationnaire

Dans les méthodes que nous venons de présenter, la variable temporelle n'intervient pas. On peut alors se demander comment réaliser un couplage en cinétique. Pour l'expliquer, commençons par donner une forme générale du couplage, comme nous l'avons fait dans la section 3.1 :

$$\begin{cases} \frac{\partial x_1}{\partial t} = G_1(x_1, x_2) \\ \frac{\partial x_2}{\partial t} = G_2(x_1, x_2) \end{cases} \quad (4.1)$$

Sauf systèmes très particuliers, après avoir choisi un schéma numérique, on obtient des résolutions de type :

$$\begin{cases} x_1(t + \Delta t) = x_1(t) + h_1(x_2(t + \Delta t), \Delta t) \\ x_2(t + \Delta t) = x_2(t) + h_2(x_1(t + \Delta t), \Delta t), \end{cases} \quad (4.2)$$

Où les h_i sont des fonctions continues telles que $\lim_{\Delta t \rightarrow 0} h_i(x, \Delta t) = 0 \ \forall x$.

En posant :

$$\begin{cases} F_1(u_1, u_2) = u_1 - x_1(t) - h_1(u_2, \Delta t) \\ F_2(u_1, u_2) = u_2 - x_2(t) - h_2(u_1, \Delta t) \end{cases}$$

On se ramène à la forme déjà étudiée :

$$\begin{cases} F_1(x_1, x_2) = 0 \\ F_2(x_1, x_2) = 0 \end{cases}$$

Les méthodes déjà vues s'appliquent donc directement, mais nous disposons d'un paramètre supplémentaire qui permet d'influer sur la force du couplage ainsi défini à chaque pas de temps : le pas de temps lui-même. Notamment, lorsqu'on utilise une méthode de Gauss-Seidel, le critère de convergence ($\exists M < 1, \|J\| \leq M$) se vérifie automatiquement pour Δt suffisamment petit.

Le pas de temps nécessaire à Gauss-Seidel est malheureusement parfois trop petit pour être exploitable (calcul du transitoire trop long), et on se tourne alors vers les autres méthodes déjà présentées.

Notons qu'il existe une difficulté purement technique, mais parfois difficile à contourner, pour la mise en place de schémas couplés évoluant : les méthodes présentées sont itératives, il faut donc être capable de recalculer plusieurs fois le même pas de temps, sans modifier les variables en début du pas de temps (les $x_i(t)$ dans nos notations). Cependant les codes « oublient » parfois $x_i(t)$ pendant le calcul de $x_i(t + \Delta t)$.

4.1.2 Couplage explicite

Pour gagner du temps de calcul lorsque les couplages sont faibles, mais aussi du fait de la difficulté technique que nous venons d'évoquer, on souhaite souvent calculer un transitoire couplé sans itérer à chaque pas de temps.

Pour cela, nous allons regarder la façon dont une erreur évolue pendant le calcul d'un transitoire, que le phénomène modélisé soit issu d'un couplage ou pas. Écrivons une forme générale pour un problème d'évolution :

$$\frac{\partial x}{\partial t} = F(x).$$

On suppose que l'on utilise un schéma explicite classique, ce qui nous donne :

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \Delta t F(x(t)).$$

Notons x_e la solution exacte du problème, et supposons que l'on ait au début du pas de temps $x(t) = x_e(t) + \varepsilon(t)$. Nous allons également noter ε' l'erreur introduite par le schéma lui-même (qui est d'ordre 1 en temps) sur le pas de temps que l'on calcule : $x_e(t) + \Delta t F(x_e(t)) = x_e(t + \Delta t) + \varepsilon'(t + \Delta t)$.

Avec ceci on a :

$$\begin{aligned} x(t + \Delta t) &= x_e(t) + \varepsilon(t) + \Delta t F(x_e(t) + \varepsilon(t)) \\ &= x_e(t) + \varepsilon(t) + \Delta t \left(F(x_e(t)) + F(x_e(t) + \varepsilon(t)) - F(x_e(t)) \right) \\ &= x_e(t + \Delta t) + \varepsilon'(t + \Delta t) + \varepsilon(t) + \Delta t \left(F(x_e(t) + \varepsilon(t)) - F(x_e(t)) \right). \end{aligned}$$

Ainsi on peut écrire $\varepsilon(t + \Delta t) = f(\varepsilon(t))$ avec :

$$f(u) = u + \Delta t \left(F(x_e(t) + u) - F(x_e(t)) \right) + \varepsilon'(t + \Delta t).$$

Lorsqu'on avance dans le temps, l'erreur commise évolue donc presque comme si on faisait des itérations de point fixe avec la fonction f ainsi définie. L'équivalence n'est tout de même pas parfaite puisque x_e et ε' évoluent avec le temps. Pour comprendre ce qui se passe, supposons que ces quantités sont constantes (ce qui revient à dire que l'on vérifie la stabilité d'un état stationnaire), et que l'on est à une dimension. Dans ce cas, la convergence a lieu si (voir section 3.2.4) $|f'(u)| < 1$, soit si $F'(u) \in]\frac{-2}{\Delta t}, 0[$.

La borne haute, $F'(u) < 0$, signifie que le système étudié doit être lui-même (statiquement) stable. Quant à la borne basse, on remarque qu'en diminuant le pas de temps elle peut être arbitrairement petite. Ainsi avec un pas de temps suffisamment petit, l'erreur commise par un schéma de couplage explicite peut rester bornée.

On constate néanmoins que l'erreur commise est en $O(\Delta t)$. Le schéma explicite est donc précis au premier ordre en temps. Le formalisme utilisé est valable quand on fait évoluer en temps un problème couplé et que l'on ne converge pas le couplage à chaque pas de temps. Ainsi, la façon de réaliser le couplage peut réduire la précision de la solution à un ordre 1 en temps, même si les solveurs eux-mêmes ont une meilleure précision. Ce point est particulièrement important. En s'économisant le travail de réflexion sur le schéma de couplage, on risque de perdre le bénéfice de tout le travail investi dans les codes eux-mêmes.

4.1.3 Gauss-Seidel et Newton

Repartons de la forme générale (4.1) où l'on va négliger la dépendance des G_i en x_i . L'utilisation d'une méthode de convergence à chaque pas de temps, comme Gauss-Seidel ou Newton autorise l'emploi d'un schéma plus efficace que le schéma explicite. On peut par exemple utiliser le schéma semi-implicite de Crank-Nicolson, qui est précis à l'ordre 2 en temps (voir [71] par exemple), c'est à dire avec une erreur en $O(\Delta t^2)$, ce qui peut permettre d'envisager des pas de temps moins fins :

$$\frac{x_1(t + \Delta t) - x_1(t)}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left(G_1(x_2(t)) + G_1(x_2(t + \Delta t)) \right).$$

Ce qui nous donne :

$$x_1(t + \Delta t) = x_1(t) + \frac{\Delta t}{2} \left(G_1(x_2(t)) + G_1(x_2(t + \Delta t)) \right).$$

On a bien sûr le même type de développement pour l'équation sur x_2 . On constate qu'on a bien une résolution de la forme annoncée (4.2), avec un contrôle des termes de couplage par le pas de temps. Ainsi, si les variables sont monodimensionnelles, on a convergence des itérations de Gauss-Seidel si :

$$\left| \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \frac{\partial G_1(x_2(t + \Delta t))}{\partial x_2} \frac{\partial G_2(x_1(t + \Delta t))}{\partial x_1} \right| < 1.$$

Si ce n'est pas le cas, il est nécessaire de se tourner vers un autre type de méthode de résolution, Newton par exemple.

4.1.4 Conclusion

Lorsqu'on calcule un transitoire couplé, on a donc trois possibilités « classiques » pour en assurer la convergence :

1. Couplage explicite à chaque pas de temps (sans convergence), et pas de temps suffisamment petit ;
2. Convergence du couplage (alors semi-implicite ou implicite) à chaque pas de temps avec Gauss-Seidel et un pas de temps suffisamment petit ;
3. Convergence du couplage (alors semi-implicite ou implicite) à chaque pas de temps avec une autre méthode (Newton par exemple).

La première méthode réduit la précision de la solution à un ordre 1 en temps, ce qui oblige l'utilisation d'un maillage temporel fin, indépendamment de la précision des codes que l'on couple.

Les autres méthodes permettent d'obtenir un ordre 2 en temps, et donc d'augmenter les tailles des pas de temps (sous réserve de stabilité, notamment si on utilise un schéma de Crank-Nicolson). Une autre utilisation possible de ces méthodes itératives est l'utilisation d'un schéma implicite pour sa stabilité. Tout cela n'est cependant possible que si les itérations de couplage convergent à chaque pas de temps. Il faudra donc toujours faire attention à ne pas utiliser un pas de temps trop grand, surtout avec Gauss-Seidel.

Tout ce que nous venons de voir démontre bien qu'un couplage introduit des contraintes sur le pas de temps qui se rajoutent à celles des codes que l'on couple. Qui réalise un couplage temporel doit garder ce point en tête.

4.2 Amélioration de la précision du couplage explicite

La facilité de mise en œuvre et la rapidité d'exécution du couplage explicite a poussé au développement de techniques pour en améliorer la précision. Nous en citons deux exemples classiques ici (présentés par [138]).

4.2.1 Maillages temporels décalés

Le développement limité de $\frac{x_1(t + \Delta t) - x_1(t)}{\Delta t}$ en $t + \frac{\Delta t}{2}$ permet de montrer qu'il s'agit d'une approximation à l'ordre 2 de la dérivée temporelle de x_1 prise en $t + \frac{\Delta t}{2}$.

Ainsi le schéma suivant :

$$\frac{x_1(t + \Delta t) - x_1(t)}{\Delta t} = G_1 \left(x_2 \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right) \right)$$

est précis à l'ordre 2 en temps.

Cette constatation amène à l'utilisation de schémas décalés :

$$\begin{cases} \frac{x_1(t + \Delta t) - x_1(t)}{\Delta t} = G_1 \left(x_2 \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right) \right) \\ \frac{x_2 \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right) - x_2 \left(t - \frac{\Delta t}{2} \right)}{\Delta t} = G_2(x_1(t)). \end{cases}$$

Le maillage temporel de chaque discipline est décalé par rapport à celui de l'autre discipline, ce qui permet d'atteindre une précision d'ordre 2 en temps pour le couplage. Cette méthode n'est qu'une réécriture de la méthode de splitting de Strang [113].

4.2.2 Traitement d'ordre plus élevé des non-linéarités

Soit f une fonction \mathcal{C}^1 de t . Si on injecte l'approximation de f' : $f'(t) = \frac{f(t) - f(t - \Delta t)}{\Delta t} + O(\Delta t)$ dans un développement limité classique de $f(t + \Delta t)$ en t , on obtient :

$$f(t + \Delta t) = 2f(t) - f(t - \Delta t) + O(\Delta t^2).$$

Dans [98], il est suggéré d'utiliser ce développement pour prédire x_1 et x_2 en $t + \Delta t$ et d'utiliser ces prédictions dans un schéma d'ordre 2 en temps, comme Crank-Nicolson.

On écrit ainsi (on note avec un exposant P les prédictions) :

$$\begin{aligned} x_2^P(t + \Delta t) &= 2x_2(t) - x_2(t - \Delta t) \\ x_1^P(t + \Delta t) &= 2x_1(t) - x_1(t - \Delta t), \end{aligned}$$

Puis :

$$\begin{aligned} x_1(t + \Delta t) &= x_1(t) + \frac{\Delta t}{2} \left(G_1(x_2(t)) + G_1(x_2^P(t + \Delta t)) \right) \\ x_2(t + \Delta t) &= x_2(t) + \frac{\Delta t}{2} \left(G_2(x_1(t)) + G_2(x_1^P(t + \Delta t)) \right). \end{aligned}$$

Grâce à cette méthode, qui peut être vue comme un prédicteur-correcteur, on obtient une précision d'ordre 2 en temps.

4.2.3 Conclusion

Les deux méthodes que nous venons de voir permettent d'obtenir, très facilement, une précision d'ordre 2 sur un couplage explicite en temps (sans itération sur le couplage à chaque pas de temps). Cela permet notamment de gagner en temps de calcul en augmentant la taille des pas de temps. Il faut néanmoins faire attention au fait que ce ne sont pas des méthodes implicites et que leur stabilité peut rester conditionnelle.

A cause de cette question de stabilité, ou pour améliorer encore la précision de la solution (même si on reste souvent à l'ordre 2), on se tourne parfois vers des méthodes itératives comme Gauss-Seidel ou Newton. Notons que ces dernières peuvent tout à fait être initialisées par la méthode de prédiction des termes non-linéaires que nous venons de voir section 4.2.2, ce qui accélère leur convergence.

4.3 Contrôle du pas de temps

Nous avons vu qu'il existe de nombreuses méthodes pour réaliser un couplage temporel qui, contrairement au cas explicite simple, ont une précision d'ordre 2 en temps. En outre, les méthodes itératives, qui peuvent utiliser un schéma temporel implicite, peuvent s'affranchir de contraintes sur le pas de temps, comme la condition classique Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) (le déplacement, à chaque pas de temps, doit être inférieur à une maille) introduite par la résolution de l'équation d'advection par un schéma explicite. Ce dernier point est bien illustré dans [98] et dans [92].

Une façon de tirer parti de ces deux avancées des schémas numériques, pour gagner en temps de calcul, consiste à augmenter la taille des pas de temps. Cependant, un pas de temps fin reste nécessaire pour certains transitoires, ou certaines phases de transitoire, lorsque les variations sont rapides. On comprend donc la nécessité de trouver un algorithme d'adaptation du pas de temps.

La première technique, extraite de [98], peut s'utiliser lorsque le schéma numérique fournit une estimation de l'erreur commise. On écrit alors :

$$\Delta t^{new} = S \Delta t^{old} \left(\frac{\tau}{err} \right)^{\frac{1}{p+1}},$$

Avec p l'ordre global de la méthode, err l'estimation de l'erreur, τ une tolérance choisie par l'utilisateur et S un facteur de sûreté.

Il est également possible de chercher à estimer puis à borner le terme dominant de l'erreur de troncature des schémas numériques. Cette idée est présentée dans [48], puis reprise dans [93], dans le cadre de la résolution temporelle de la diffusion neutronique. Cette méthode nécessite notamment d'estimer la dérivée temporelle seconde du flux neutronique. Ces papiers mettent en avant une approximation particulière de la dérivée seconde par différences finies qui donne de meilleurs résultats, en terme de stabilité, que la différence finie classique.

Si l'on ne dispose pas de suffisamment d'informations pour utiliser les méthodes précédentes (c'est souvent le cas dans le cadre d'un couplage puisqu'il ne faut pas oublier de prendre en compte l'influence du couplage lui-même), on peut simplement chercher à limiter la variation relative de nos variables sur chaque pas de temps (idée issue de [92]) :

$$\Delta t^n = \eta_{dyn} \min_{x,i} \left(\left| \frac{2}{x_i^n + x_i^{n-1}} \frac{x_i^n - x_i^{n-1}}{\Delta t^{n-1}} \right|^{-1} \right),$$

Où x représente les variables de notre système et i l'indice sur le maillage spatial.

Dans [75], [76] et [77], l'auteur compare un JFNK préconditionné par une méthode approchée (*Operator Split Semi-Implicit* (OSSSI), c'est-à-dire une méthode de type point-fixe), avec l'utilisation de la méthode approchée seule. La solution trouvée par le JFNK se trouve être plus précise que celle de l'OSSSI et permet notamment l'utilisation de pas de temps beaucoup plus grands que ceux admissibles par la méthode approchée. Il arrive ainsi à des solutions à la fois plus précises et plus rapides (dans [77], 10min contre plus de 2 jours pour la même précision) avec le JFNK préconditionné qu'avec la simple méthode approchée. Ces résultats tendent à montrer l'intérêt des méthodes de type JFNK pour le calcul de transitoires.

Conclusion de la première partie

5.1 Aperçu de la problématique spatiale du couplage

Jusqu'ici nous avons considéré un formalisme simple de couplage où les codes travaillent avec les mêmes variables, nommées x_1 et x_2 dans le système (3.1). Ce cas n'est rigoureusement vrai que si les différents composants sont définis sur le même domaine physique, avec le même maillage et la même description (éléments finis par exemple). En réalité, les codes travaillent généralement sur des domaines qui ne se recouvrent pas tout à fait et avec des maillages différents, adaptés à chacune des physiques. En outre, il arrive souvent que les codes travaillent sur des domaines qui ne communiquent qu'à travers des interfaces de dimension inférieure. Le problème peut encore se compliquer si la position de l'interface ou des sous-domaines les uns par rapport aux autres est elle-même un résultat de calcul.

Nous ne donnerons qu'un aperçu rapide de cette question dans cette section. Le lecteur pourra trouver plus de détails et de références dans [57].

La gestion de cette problématique se ramène souvent à rechercher une forme d'interpolation, voire d'extrapolation, qui soit efficace et limite la perte d'information. On souhaite de plus souvent le respect de certaines propriétés, comme la conservation d'intégrales spatiales (conservation de bilans globaux ou locaux), ou que le calcul de la divergence d'un champ reste nul avec la nouvelle discrétisation (typiquement pour le champ de vitesses d'un fluide incompressible).

Lorsque les domaines communiquent par des interfaces, la technique à deux grilles (two-grid), présentée dans [28], permet des gains de temps considérables, mais diminue la précision et la stabilité de la solution. La méthode consiste à résoudre une première fois le problème couplé sur un maillage grossier, puis à résoudre une seconde fois les disciplines séparément, sur un maillage fin, en utilisant les valeurs aux interfaces obtenues par le premier calcul.

La méthode des éléments finis avec joints s'utilise également lorsque les domaines communiquent sur des interfaces. Elle est utile si les maillages des interfaces ne se correspondent pas. Elle est présentée dans [13, 12].

Enfin, on peut utiliser des méthodes de décomposition de domaines, lorsque les disciplines communiquent via des interfaces, pour réaliser un couplage plus intriqué, tout en imposant certaines conditions aux interfaces. [120, 97] sont des ouvrages qui font références dans ce domaine.

5.2 Quelques exemples de couplages intriqués

Cette revue des techniques de couplage ne serait pas complète sans un mot sur les méthodes intriquées.

D'après notre définition, on fait du couplage intriqué dès que l'on ne fait pas appel à des solveurs distincts, incapables de prédire l'impact des variables qu'ils calculent sur les autres. Il s'agit donc de chercher de meilleures solutions en prenant en compte l'aspect multiphysique dès la conception des outils de calcul.

Le cas idéal est d'arriver à éliminer complètement une des variables couplées par un calcul analytique. C'est par exemple ce qui est fait classiquement, et que l'on a repris et expliqué un peu plus loin, section 8.3.2, pour le traitement des précurseurs en neutronique cinétique. On peut citer également comme exemple [30, 54] pour un couplage analytique entre neutronique et thermohydraulique sur un système simplifié, ou [62] sur des écoulements dans des milieux poreux déformables. Une approche originale est entreprise dans [134], sorte de couplage séquentiel entre neutronique et thermique amélioré par des considérations analytiques.

De façon plus prosaïque, on peut aussi chercher à mettre les équations couplées sous la forme d'un unique système linéaire. C'est par exemple l'idée de la méthode d'homogénéisation développée en interaction fluide-structure (et utilisée dans cette thèse) par Daniel Broc [19, 20]. On y construit un système linéaire mêlant pression (variable hydraulique) et accélération de la structure (variable mécanique). La construction de ce système passe par une linéarisation, et donc une simplification, des équations.

L'approximation linéaire n'étant pas toujours valable, il n'est pas toujours possible de linéariser les équations. Les méthodes de résolution de systèmes non-linéaires, vues plus haut (itération de point fixe et Newton principalement), sont ainsi toujours utilisées, même pour la résolution d'un problème intriqué. Le fait d'intriquer le couplage consiste alors à prendre en compte, dans la résolution du système linéaire qui intervient inmanquablement à chaque itération de l'algorithme utilisé, des termes couplant les disciplines entre elles. On économise ainsi, normalement, des itérations globales. On peut citer par exemple [126, 34] où un algorithme de Newton global entre neutronique et thermohydraulique est présenté. Sans aller jusqu'à construire une jacobienne globale complète, on peut aussi chercher simplement à introduire quelques termes clefs de couplage dans les jacobienes monodisciplinaires. Cela peut se faire lorsqu'on couple des solveurs basés sur des algorithmes de Newton, en les adaptant légèrement. On voit alors que la frontière entre couplage intriqué et séquentiel devient moins nette. Un peu de la même manière, la méthode JFNK (ainsi que, dans une certaine mesure, l'accélération d'Anderson de Gauss-Seidel), présentée section 3.4, avait été classée comme séquentielle car utilisable avec des solveurs distincts, mais permet de reproduire ce que l'on appelle un couplage intriqué ici. C'est ce qui fait sa popularité.

Retenons simplement l'idée qu'en développant un solveur directement multidisciplinaire, il est possible de faire mieux que ce que permettent les techniques de couplage séquentielles. L'effort de développement est cependant plus grand, et il y a un risque de perdre en flexibilité. On peut par exemple s'attendre à ce qu'il soit plus facile de changer la modélisation d'une des disciplines couplées lorsque le couplage est séquentiel que lorsqu'il est intriqué.

5.3 Synthèse

La présente partie recense et détaille les principales techniques de couplage de la littérature, avec et sans intervention explicite du temps. L'accent est mis sur l'algorithmique du couplage.

Pour les couplages dits stationnaires, nous avons vu qu'il y a deux catégories de méthodes qui s'opposent : Gauss-Seidel et Newton. En effet, le JFNK n'est qu'une façon d'utiliser l'algorithme de Newton sur un cas complexe, de façon non intrusive. Le JFNK préconditionné et la méthode ABN sont des améliorations ou des variantes du JFNK. La méthode ASPIN, également basée sur l'algorithme de Newton, ne débouche pas sur un algorithme original, mais est intéressante pour ce qu'elle nous apprend.

La méthode de Gauss-Seidel est très facile à mettre en œuvre et est la méthode utilisée intuitivement quand on débute dans le couplage. Il ne faut pas pour autant en conclure que l'algorithme de Newton est supérieur en tout à l'algorithme de Gauss-Seidel. Le principal avantage de la méthode de Newton est sa vitesse de convergence quadratique plutôt que linéaire. Il faudra donc la préférer si l'on souhaite un couplage performant. Si l'on est simplement intéressé par la solution du problème couplé, l'algorithme de Gauss-Seidel est généralement suffisant. L'utilisation d'une relaxation, qui peut être déterminée de façon empirique, suffit à le rendre très robuste. Seuls les cas, assez rares dans les faits, où l'algorithme diverge sans osciller ne peuvent être stabilisés avec une relaxation. L'algorithme de Newton peut, quant à lui, s'utiliser théoriquement sur n'importe quel cas, mais à la condition que l'initialisation soit suffisamment bonne. Même si l'utilisation d'une relaxation est susceptible d'améliorer grandement son comportement, l'algorithme de Newton est parfois moins robuste que celui de Gauss-Seidel, car plus sensible au bruit.

Il est tentant, lorsqu'on fait du couplage, de dégrader la convergence de chacun des codes dans l'espoir d'accélérer la convergence globale. Il est en effet inutile de converger parfaitement un calcul intermédiaire qui donne un résultat très éloigné de la solution finale. La méthode ASPIN est incluse dans cette revue comme une mise en garde contre cette pratique : elle consiste à faire exactement l'inverse, en définissant des sous-problèmes à résoudre indépendamment les uns des autres, pour accélérer la convergence de problèmes de grandes tailles. On peut en conclure que la bonne pratique dépend de la situation. Dans certains cas, dégrader la convergence des codes individuels permet effectivement de substantiels gains de temps ([16, 15] présentent de fait des stratégies de contrôle de la précision d'algorithmes itératifs emboîtés). Dans d'autres cas, la dégradation de la robustesse du schéma global et l'augmentation du nombre d'itérations de couplage (et donc des communications) réduisent l'intérêt de cette approche, voire la rendent néfaste.

Lorsqu'on traite un couplage instationnaire, il faut retenir qu'un simple couplage explicite "naïf" dégrade la précision globale à un ordre 1 en temps. Cependant, il y a des "astuces" très simples qui permettent de récupérer un ordre 2 en temps, tout en gardant un simple chaînage des disciplines à chaque pas de temps : l'utilisation de maillages temporels décalés (mais ce n'est pas possible lorsque les disciplines travaillent avec des pas de temps différents) ou ce qu'on a appelé traitement d'ordre plus élevé des non-linéarités, c'est à dire une simple extrapolation linéaire des résultats. Il ne faut pas se priver d'utiliser ces méthodes. On peut obtenir encore de meilleures stabilité et précision en convergeant le couplage à chaque pas de temps avec les techniques issues des couplages stationnaires. Cette approche peut sembler

a priori chère mais, dans certains cas, permet de gagner globalement en temps de calcul en augmentant significativement la taille des pas de temps.

Deuxième partie

Prise en compte de déformations mécaniques en neutronique

Table des matières

Chapitre 6	Introduction de la deuxième partie	61
6.1	Objectifs	61
6.2	Données utilisées	62
6.3	Méthodes existantes dans la littérature	62
6.3.1	Préambule : présentation de la théorie des perturbations	62
6.3.2	Calcul direct simple	65
6.3.3	Altérations de la densité des matériaux	65
6.3.4	Autres utilisations de la théorie des perturbations	66
6.3.5	Déformation de maillage	67
6.3.6	Pixellisation ou projection de maillage	67
6.3.7	Utilisation de codes de Monte-Carlo	68
6.3.8	Méthodes d'analyse du bruit neutronique	68
6.3.9	Prise en compte de la vitesse de déplacement de la matière sur le transport des neutrons	68
6.4	Présentation de Phénix et des essais de gerbage	69
6.4.1	Phénix et les AURN	69
6.4.2	Description des essais statiques et résultats expérimentaux	71
Chapitre 7	Déformation de géométrie à maillage fixe avec APOLLO3®	75
7.1	Déplacement de la matière	75
7.1.1	Présentation de la méthode	75
7.1.2	Evaluation de la méthode	80
7.1.3	Quelques études pour tenter d'identifier les effets importants	83
7.2	Déplacement des précurseurs de neutrons retardés	88
7.2.1	Présentation de la méthode	88
7.2.2	Evaluation de la méthode	90
7.3	Application aux essais de gerbage de Phénix	92
7.3.1	Interprétation antérieure des essais statiques	93
7.3.2	Notre tentative d'interprétation des essais de gerbage statiques	93
7.3.3	Application de notre méthodologie à un transitoire inspiré des essais de gerbage dynamique	97

Chapitre 8	Déformation de géométrie à maillage mobile avec CAST3M	101
8.1	Quelques rappels sur la méthode des éléments finis	102
8.1.1	Formulation variationnelle	102
8.1.2	Éléments finis	103
8.1.3	Conditions aux limites	105
8.2	Implémentation d'un solveur de diffusion neutronique stationnaire dans CAST3M	105
8.2.1	Méthode de résolution	105
8.2.2	Convergence du solveur	107
8.2.3	Calcul d'un flux adjoint	108
8.2.4	Evaluation du solveur	109
8.3	Implémentation d'un solveur de diffusion neutronique cinétique dans CAST3M	116
8.3.1	Initialisation du calcul	116
8.3.2	Méthode de résolution	118
8.3.3	Evaluation du solveur	124
8.4	Application à une géométrie déformée : les essais de gerbage de Phénix	129
8.4.1	Description de la géométrie et des déplacements dans CAST3M	129
8.4.2	Réflexion sur le traitement du flux en géométrie mobile lors de calculs cinétiques	132
8.4.3	Gerbage statique	132
8.4.4	Gerbage dynamique	133
Chapitre 9	Conclusion de la deuxième partie	135

Introduction de la deuxième partie

6.1 Objectifs

Cette partie de la thèse se décompose en deux chapitres principaux (7 et 8). Dans chacun d'entre eux nous présentons une méthode, développée pendant cette thèse, pour prendre en compte des effets mécaniques en neutronique. La première est une méthode de pixellisation basée sur APOLLO3®. La seconde méthode repose, quant à elle, sur un maillage mobile qui suit le déplacement de matière. Elle a été mise en place dans le code de mécanique CAST3M.

Pourquoi deux méthodes ? Tout d'abord, ce sont les deux seules méthodes identifiées (voir section 6.3) permettant un calcul direct (c'est à dire sans utilisation de la théorie des perturbations et donc sans hypothèse de petites déformations), avec un code déterministe, de cœurs déformés de façon quelconque. Il est donc intéressant dans cette thèse, qui porte sur les techniques de couplage neutronique-mécanique, de mettre en place ces deux approches, de les tester, et d'identifier leurs limites et les difficultés à leur utilisation.

En plus de cet objectif de comparaison, le développement de chacune de ces méthodes suit des buts secondaires différents.

La méthode de pixellisation dans APOLLO3® permet de démontrer la faisabilité d'un couplage neutronique-mécanique avec les outils de référence. L'utilisation de codes de référence dûment vérifiés et validés est indispensable lorsqu'on mène une étude à fin industrielle. Ces outils offrent également robustesse, fiabilité et efficacité, ce qui peut être mis à profit, par exemple en menant des études sur l'impact de points de modélisation sur lesquels il aurait été difficile d'avoir la main dans un "code maison". Enfin, ce développement pourra servir à fournir un point de comparaison à la deuxième méthode, qui elle n'est pas basée sur un outil de référence en neutronique. En revanche, il est difficile d'envisager autre chose qu'un couplage séquentiel entre codes distincts avec cette approche.

A l'inverse, le développement d'une méthode à maillage mobile dans CAST3M permet de réaliser les calculs mécaniques et neutroniques dans le même environnement. L'utilisation de techniques de couplage plus intriquées est ainsi envisageable. La manipulation du maillage et le transfert des données sont également simplifiés par l'utilisation d'un environnement unique. Cette approche a donc été utilisée pour la suite du travail de thèse, portant sur les techniques de couplage.

6.2 Données utilisées

Les éléments de contexte détaillés section 1.1 ont motivé l'application des méthodes présentées ici aux réacteurs à neutrons rapides, et en particulier à Phénix (ce dernier est présenté un peu plus loin, section 6.4). Les calculs que nous présentons dans la suite ont été menés sur deux jeux de données nucléaires que nous introduisons ici. Ce sont deux descriptions du réacteur expérimental Phénix.

Pour les vérifications de bon fonctionnement des méthodes, nous utilisons des compositions de cœur neuf issues des données de démantèlement du réacteur [88]. Les sections efficaces sont générées par un calcul d'autoprotection très simple, effectué par le module ECCO d'ERANOS [104], en une seule étape avec des assemblages homogènes et 33 groupes d'énergie. Les données nucléaires de base sont issues de la bibliothèque JEFF-3.1.1 [108]. Les calculs 3D utilisant ces données comportent 32 mailles axiales.

Pour les confrontations aux essais de gerbage (voir section 6.4.2), nous utilisons des compositions représentatives d'un cœur irradié comme l'était celui de Phénix lors des essais. L'évolution des compositions du cœur et les calculs d'autoprotection sont réalisés par un jeu de données ERANOS fourni par l'équipe ayant réalisé la première interprétation de ces essais [41, 94]. L'autoprotection est faite de façon précise avec un passage à un maillage énergétique fin (1968 groupes) et à une géométrie hétérogène de l'assemblage, avant condensation à 33 groupes sur une géométrie homogène. Les données nucléaires sont toujours issues de JEFF-3.1.1. Pour les calculs d'évolution, la partie combustible du cœur est divisée en 10 zones axiales. Sur chacune d'entre elles, nous disposons d'une composition par couronne d'assemblages. Pour les milieux non combustibles, nous disposons d'une unique composition. Cela monte à 81 le nombre de compositions, auxquelles on rajoute éventuellement le sodium inter-assemblage. On utilise, pour les calculs 3D avec ces données, 14 mailles axiales.

6.3 Méthodes existantes dans la littérature

Avant d'aller plus loin, passons en revue les différents types d'approches qui existent dans la littérature pour prendre en compte des effets mécaniques en neutronique.

6.3.1 Préambule : présentation de la théorie des perturbations

La théorie des perturbations a été développée pour permettre d'analyser l'effet de petites perturbations du réacteur sur la réactivité. Il est bien sûr toujours possible de faire un nouveau calcul complet sur le cœur perturbé, mais cela est non seulement coûteux en temps, mais peut aussi générer des erreurs numériques si les perturbations sont faibles (notamment parce que les différences sont mal calculées numériquement si elles sont faibles). On verra également que la théorie des perturbations permet de décomposer un effet en réactivité.

Elle s'utilise d'autant plus naturellement lorsque les perturbations considérées sont mécaniques, du fait qu'il est malaisé de modéliser directement un cœur déformé en neutronique.

La théorie des perturbations est très utilisée et est exposée dans de nombreux ouvrages. Des considérations mathématiques autour de cette théorie peuvent être trouvées dans [89]. Pour

une interprétation plus physique, [21] est une bonne référence. Les opérateurs adjoints y sont notamment déduits explicitement de considérations physiques. On peut citer également [39] comme article de référence sur la question.

a. Notion d'opérateur adjoint

Soit H un espace de Hilbert, c'est à dire un espace vectoriel muni d'un produit scalaire, noté $\langle \cdot, \cdot \rangle$, dont la norme associée ($\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle}$) est complète. C'est le cas des espaces que l'on considèrera naturellement par la suite. On dit que l'opérateur a^* est l'adjoint de a si :

$$\forall x, y \in H, \langle x, a(y) \rangle = \langle a^*(x), y \rangle$$

On rappelle que le produit scalaire est symétrique. On admettra l'existence et l'unicité de l'adjoint pour les opérateurs linéaires. Rappelons également que l'adjoint d'une matrice est simplement la transposée de la matrice conjuguée.

b. Le flux adjoint

Notons A l'opérateur regroupant diffusion, absorption et ralentissement, et F l'opérateur de fission. Ces deux opérateurs sont bien linéaires et en notant ϕ le flux et K_{eff} le coefficient multiplicateur (voir section 1.4 pour une introduction à la neutronique et à ces concepts), on a :

$$A\phi = \frac{1}{K_{eff}}F\phi. \quad (6.1)$$

On note A^* et F^* les opérateurs adjoints de A et F pour le produit scalaire classique : $\langle f, g \rangle = \int_{\Omega} f(x)g(x)dx$ (l'intégrale porte sur toutes les variables, c'est à dire position, énergie et direction pour un flux). Le flux adjoint, noté ϕ^* , est défini comme la solution de :

$$A^*\phi^* = \frac{1}{K_{eff}}F^*\phi^*. \quad (6.2)$$

Le flux adjoint s'interprète physiquement comme le nombre asymptotique de neutrons résultant du rajout d'un neutron à une certaine position, et avec une certaine vitesse et direction, dans le réacteur. Cette grandeur diverge pour un réacteur critique ou sur-critique, et le flux adjoint devient alors une grandeur relative définie à un facteur multiplicatif près, comme le flux lui-même. Du fait de cette interprétation physique, on appelle aussi le flux adjoint "fonction importance".

Le lecteur pourra se convaincre de cette interprétation physique avec [21].

c. Perturbations

En calculant l'intégrale de (6.1) pondérée par le flux adjoint, on obtient :

$$K_{eff} = \frac{\langle F\phi, \phi^* \rangle}{\langle A\phi, \phi^* \rangle}$$

Remarquons que l'on peut obtenir la même équation à partir de (6.2) en pondérant par le flux direct (c'est d'ailleurs ainsi que l'on démontre que c'est bien le même K_{eff} qui intervient

dans les deux équations). Cette première équation, qui reste valable en remplaçant le flux ou le flux adjoint par n'importe quelle autre fonction, est parfois utilisée sous la forme donnée pour décomposer des contributions à la réactivité. Le sens physique de cette décomposition reste néanmoins faible.

Pour voir véritablement l'intérêt de cette approche, introduisons des opérateurs perturbés et le flux direct qui en découle avec un $\hat{\cdot}$. L'équation (6.1) devient alors :

$$\hat{A}\hat{\phi} = \frac{1}{\hat{K}_{eff}}\hat{F}\hat{\phi}. \quad (6.3)$$

Pour simplifier la suite, notons $H = A - \frac{1}{K_{eff}}F$. On a donc $H\phi = 0$. On introduit de même \hat{H} . Si on note avec un δ les différences aux opérateurs et variables non perturbés, on obtient :

$$\hat{H}\hat{\phi} = 0 = (H + \delta H)(\phi + \delta\phi).$$

En utilisant $H\phi = 0$, il nous reste :

$$H\delta\phi + \delta H\phi + \delta H\delta\phi = 0.$$

On multiplie maintenant par le flux adjoint et on intègre pour obtenir :

$$\langle H\delta\phi, \phi^* \rangle + \langle \delta H(\phi + \delta\phi), \phi^* \rangle = 0$$

En utilisant la définition de l'opérateur adjoint et le fait que $H^*\phi^* = 0$, le premier terme s'élimine. La définition de H nous permet d'en déduire :

$$\frac{1}{\hat{K}_{eff}} - \frac{1}{K_{eff}} = \frac{\langle (\delta A - \frac{1}{K_{eff}}\delta F)(\phi + \delta\phi), \phi^* \rangle}{\langle (F + \delta F)(\phi + \delta\phi), \phi^* \rangle},$$

ce qu'on écrit plutôt en utilisant la réactivité $\rho = \frac{K_{eff} - 1}{K_{eff}}$:

$$\delta\rho = -\frac{\langle (\delta A - \frac{1}{K_{eff}}\delta F)(\phi + \delta\phi), \phi^* \rangle}{\langle (F + \delta F)(\phi + \delta\phi), \phi^* \rangle}. \quad (6.4)$$

L'équation (6.4), qui a été établie sans aucune hypothèse, est utilisée pour décomposer un effet en réactivité. C'est ainsi que l'on obtient des coefficients de contre-réaction locaux par exemple. On remarque qu'il est nécessaire de connaître à la fois le flux adjoint de l'état initial et le flux direct de l'état perturbé.

L'utilité historique principale de la théorie des perturbations est justement d'éviter de faire un calcul perturbé. Pour cela, on remarque qu'en se limitant à l'ordre 1 (c'est à dire en éliminant les termes qui font intervenir un produit de deux " δ " ou plus), l'équation (6.4) se simplifie en :

$$\delta\rho \approx - \frac{\langle (\delta A - \frac{1}{K_{eff}}\delta F)\phi, \phi^* \rangle}{\langle F\phi, \phi^* \rangle}. \quad (6.5)$$

Cette formule permet donc, connaissant le flux direct et le flux adjoint sur la situation initiale, d'estimer très rapidement l'effet en réactivité d'une petite perturbation des opérateurs. Insistons sur le fait que (6.5) n'est valable que pour des petites perturbations, alors que (6.4) l'est toujours.

On voit que dans les deux équations précédentes, le flux adjoint joue le rôle de fonction de pondération, permettant d'identifier les termes de la somme qui impactent le plus la réactivité. On retrouve donc l'idée qu'il caractérise l'importance des neutrons pour la réaction en chaîne.

6.3.2 Calcul direct simple

Lorsque la déformation est suffisamment simple, il est possible de faire un calcul critique directement sur la géométrie déformée et d'en déduire un effet en réactivité, sans que cela implique réellement un remaillage ou une déformation du maillage. C'est ce qui est classiquement fait pour calculer des coefficients de réactivité pour les déformations usuelles des réacteurs à neutrons rapides lors des transitoires de pertes de débit [111]. Ces déformations sont les dilatations uniformes du cœur (radiale et axiale), ainsi que l'enfoncement relatif des barres de commande.

6.3.3 Altérations de la densité des matériaux

La question de l'impact d'un changement de géométrie sur une réaction en chaîne s'est posée dès les premières applications de l'énergie nucléaire, à savoir la fabrication de bombes. Les moyens de calcul de l'époque étant très limités, les ingénieurs avaient besoin de méthodes simples pour obtenir des ordres de grandeur. Nous allons présenter un principe bien connu, appliqué dès les débuts du nucléaire, et qui se place dans le cas idéalisé d'une dilatation uniforme et isotrope de tous les matériaux.

Soit V le volume d'un matériau, et N sa densité atomique. La conservation de la masse nous donne que N varie de façon inversement proportionnelle à V :

$$N \propto \frac{1}{V}$$

Soit λ le libre parcours moyen des neutrons. Des considérations simples nous donne que λ varie proportionnellement à V (Σ_{total} est ici la section efficace macroscopique total et σ_{total} la section efficace microscopique totale) :

$$\lambda \propto \frac{1}{\Sigma_{total}} = \frac{1}{N\sigma_{total}} \propto V$$

Les dimensions du système évoluant en $V^{1/3}$, le libre parcours moyen augmente plus vite que la taille du système lorsqu'il se dilate, ce qui augmente les fuites et diminue la réactivité. Si maintenant on souhaite que λ évolue en $V^{1/3}$, on doit forcer N à évoluer en $V^{-1/3}$. Ce peut être fait en augmentant artificiellement la densité des matériaux en $V^{2/3}$ après la dilatation.

On établit ainsi une équivalence (parfaite) entre dilatation uniforme et isotrope des matériaux d'un facteur α (sur le volume) et altération des densités d'un facteur $\alpha^{-2/3}$ sans changement de géométrie. Ce type de considérations permet d'obtenir par exemple une relation entre la taille d'un système et la masse critique, la quantité de matière fissile nécessaire pour entretenir la réaction en chaîne.

L'application de la théorie des perturbations a permis d'améliorer et de généraliser ce type de techniques. Cela a été fait à la fin des années 50 dans la littérature russe [112] dans le cadre du développement des réacteurs à neutrons rapides en URSS, puis récemment aux Etats-Unis [102]. Ce dernier travail a l'ambition de calculer l'effet en réactivité à l'ordre 1 de n'importe quelle déformation d'un coeur (non uniforme et non isotrope), en se basant uniquement sur des changements de densité des milieux et sur des coefficients de contre-réactions précalculés avec la théorie des perturbations. Soulignons le fait qu'un changement de densité revient à multiplier toutes les sections efficaces par le même facteur et est donc très différent des techniques de pixellisation. Il n'a pas été possible d'obtenir plus de détails sur la façon dont les changements de densité et les coefficients de contre-réactions étaient calculés. Il semble néanmoins qu'il y ait une hypothèse implicite de petites mailles, souvent licite en RNR.

La même idée, de prendre en compte des effets géométriques en modifiant les densités des matériaux sur un maillage de calcul fixe, a été suivie pour la prise en compte des effets neutroniques de dilatations thermiques dans des calculs transitoires faits avec SIMMER [136, 4]. La méthode semble différente de celle de [102], mais là encore c'est une précision à l'ordre 1 de la déformation qui est recherchée.

6.3.4 Autres utilisations de la théorie des perturbations

Nous avons déjà vu des applications de cette théorie aux méthodes d'altérations de densité, mais ce n'est pas la seule façon dont on peut l'utiliser.

Citons pour commencer un papier américain de 1981 [99], qui signale ce qui est appelé une anomalie lorsqu'on utilise la théorie des perturbations pour calculer un changement de géométrie. La théorie des perturbations est normalement utilisée pour calculer l'effet d'une petite perturbation des sections efficaces d'un grand volume. Lors d'un changement de géométrie, on cherche plutôt l'effet d'une modification forte des données nucléaires sur une petite fraction de la géométrie totale. Le papier montre alors qu'une application "naïve" de la théorie des perturbations introduit une erreur d'ordre 1 parce que le courant neutronique (le gradient du flux en diffusion) est fortement modifié sur le petit volume où a eu lieu la modification. Le courant neutronique n'est en effet pas forcément continu aux interfaces (lorsque le coefficient de diffusion ne l'est pas). Dans le cas où le changement de géométrie provient d'une dilatation d'un matériau par exemple, le problème se résout en extrapolant le courant neutronique à partir du matériau qui s'est dilaté (qui avait donc une composition proche de celle du volume modifié).

Notons que ce problème ne se pose pas lorsque la déformation est représentée par une petite altération des données nucléaires sur un volume plus grand que celui qui est effectivement affecté, c'est à dire lorsqu'on utilise une méthode de pixellisation.

La même équipe a également travaillé sur l'extension de la théorie des perturbations classiques à une modification de la frontière (là où la condition aux limites est imposée) d'un

problème de diffusion ou de transport [63, 101, 100]. Ce travail semble pouvoir s'appliquer aux modifications des frontières intérieures d'un système, et donc à un changement de la géométrie. Cette question de la perturbation de la position d'une frontière ou interface est un sujet classique en optimisation de formes. Ces perturbations se calculent normalement par la méthode d'Hadamard [49, 50].

La théorie des perturbations a également été utilisée, au début des années 80, pour étudier un réacteur expérimental américain à neutrons rapides : *Fast Flux Test Facility* (FFTF) (voir [115] pour une présentation générale du réacteur). Le design un peu particulier de ce réacteur [114], qui contraint ses déformations, oblige à mener des calculs mécaniques pour connaître la forme du coeur pendant certains transitoires. Le caractère non linéaire de ces déformations empêche l'utilisation de simples coefficients de contre-réactions, comme dans le paragraphe 6.3.2. Les effets en réactivité sont plutôt obtenus en faisant le produit de "gradients d'importance" des assemblages par les déplacements [59, 135]. Ces gradients d'importance sont obtenus par différences finies. On calcule $\langle (A - \frac{1}{K_{eff}}F)\phi, \phi^* \rangle$ sur des zones d'assemblages et on en fait la différence, que l'on divise par la distance. Cela permet de modéliser, par exemple, le fait que l'on déplace de la matière fissile d'une zone importante pour la réaction en chaîne vers une zone de moindre importance. La même chose peut être faite pour le sodium inter-assemblage qui a le déplacement opposé. L'effet en réactivité est obtenu en divisant le résultat par le taux de fission global, $\langle F\phi, \phi^* \rangle$, conformément à l'équation (6.5).

6.3.5 Déformation de maillage

Pour des déformations plus complexes que dans le paragraphe 6.3.2, mener un calcul direct sur la géométrie déformée impose de déformer le maillage de calcul, voire de le générer à nouveau. L'utilisation d'un maillage non régulier étant rarement possible dans les codes de neutronique, cette option est peu utilisée. Citons les travaux d'interprétation neutronique des essais de gergage centraux de Phénix, où, en adoptant une modélisation RZ du coeur et en négligeant l'inclinaison des assemblages, une description RZ du coeur déformé a pu être générée dans ERANOS [41, 94]. La thèse de Michele Gentili [44], réalisée en même temps que celle-ci, a, quant à elle, conduit à adapter le solveur neutronique SNATCH [68] pour qu'il puisse fonctionner sur un maillage irrégulier.

Des travaux, toujours en cours, sur les couplages multi-physiques à *Paul Scherrer Institut* (PSI), en Suisse, ont pris le parti inverse et ont conduit au développement d'un solveur neutronique transport dans un environnement volumes finis générique, OpenFOAM [80], ce qui permet l'utilisation d'un maillage quelconque [36, 37]. La même approche a été suivie dans [110] pour des travaux d'optimisation de forme d'un RNR-Na : un solveur de diffusion neutronique a été développé pour cela dans FreeFem++, langage (avec une base C++) de résolution d'équations différentielles qui permet la manipulation du maillage de calcul. Chapitre 8 nous présentons une approche similaire, développée lors de cette thèse, et utilisant CAST3M.

6.3.6 Pixellisation ou projection de maillage

Cette méthode consiste à travailler sur un maillage de calcul fixe, mais à recalculer, après chaque modification de géométrie, les intersections des milieux avec ce maillage fixe et à en déduire les nouvelles sections efficaces représentatives de la déformation.

Cette méthode, pourtant conceptuellement simple, semble avoir été peu utilisée. La raison est probablement une validité douteuse de la technique pour un Réacteur à Eau Pressurisé (REP). On peut citer pour s'en convaincre [124] qui, pour éliminer l'imprécision due à la méthode classique de type pixellisation pour suivre le mouvement d'une barre de contrôle dans un REP, propose plutôt une méthode de type déformation de maillage avec division en deux des mailles accueillant la barre. La méthode de pixellisation prend tout son intérêt en RNR, où le grand libre parcours moyen des neutrons réduit l'importance d'une description précise de la géométrie. Chapitre 7, nous présentons une méthode de pixellisation développée lors de cette thèse avec APOLLO3®. Des stages, effectués dans le même laboratoire que cette thèse, avaient déjà démontré la pertinence de cette approche pour les RNR-Na [69, 73, 61]. Une forme un peu différente de la méthode présentée dans cette thèse a été développée lors de la thèse de Michele Gentili [44, 43].

6.3.7 Utilisation de codes de Monte-Carlo

Les codes de Monte-Carlo, tels que TRIPOLI-4 [122], permettent de faire des calculs neutroniques sur n'importe quelle géométrie ou presque. Ils peuvent donc être utilisés directement pour des calculs de cœurs déformés.

6.3.8 Méthodes d'analyse du bruit neutronique

Le flux neutronique d'un réacteur présente des fluctuations, appelées bruit neutronique, qui sont mesurées. Ce bruit peut être dû à des vibrations des éléments combustibles ou des structures du réacteur. Des techniques d'analyse ont donc été développées pour étudier ce bruit neutronique et en déduire des informations sur l'état du réacteur en fonctionnement.

Ces questions ont été regardées dès les années 40 [127]. Le bruit neutronique a été analysé notamment sur Phénix [117, 66]. Ces développements ont été repris depuis les années 80 en Suède [95]. Un ouvrage paru plus récemment résume l'état de l'art dans ce domaine [96]. Le travail continue actuellement, toujours en Suède [33]. Une thèse récente, effectuée en collaboration entre le CEA Cadarache et Chalmers University of Technology, en Suède, a appliqué ces techniques aux réacteurs à neutrons rapides [139]. Des travaux sur la modélisation et l'interprétation du bruit neutronique sont également en cours au CEA Saclay, et ont donné lieu à une thèse [106, 105].

Le principe de ces techniques est de supposer que la perturbation est oscillante et qu'on est en régime établi. La solution recherchée est donc périodique. L'étude est alors menée dans le domaine spectral plutôt que temporel. Les perturbations des sections efficaces, périodiques, sont déterminées, dans les travaux cités, sur un maillage fixe d'une façon qui n'est pas sans rappeler la méthode de pixellisation.

6.3.9 Prise en compte de la vitesse de déplacement de la matière sur le transport des neutrons

Les travaux que nous venons de présenter traitent de la prise en compte de déformations mécaniques, mais ignorent l'impact du déplacement de la matière en soi sur les équations : la vitesse relative entre noyaux et neutrons est toujours supposée égale à la seule vitesse des neutrons. Cette hypothèse est quasiment toujours faite, et dans l'équation (1.1) nous avons

d'ailleurs identifié V à la vitesse des neutrons, au lieu de la vitesse relative entre noyaux et neutrons. L'hypothèse sous-jacente, très généralement vérifiée, est que la vitesse des neutrons est très grande devant celle de la matière (plus précisément, l'écart est petit devant l'épaisseur des résonances des réactions nucléaires). En toute rigueur, il faudrait par exemple prendre en compte la vitesse d'écoulement du caloporteur dans les équations neutroniques. Pour être complet, notons tout de même que la part de la vitesse des noyaux due à l'agitation thermique (à moyenne nulle), qui elle n'est pas négligeable, est prise en compte par la dépendance des sections efficaces microscopiques à la température (élargissement des résonances qui mène à l'effet Doppler).

Nous supposons, dans le cadre de cette thèse, cette hypothèse valide. La vitesse de la matière n'intervient donc pas dans nos équations.

Sur cette question, les travaux de Wienke font référence [128, 129, 130, 131, 132]. Il y a deux grandes approches, qui sont toutes deux traitées par Wienke. L'approche Lagrangienne qui consiste à écrire les équations dans le référentiel du laboratoire, ce qui conduit à adapter les sections efficaces. La difficulté est qu'elles deviennent alors toutes anisotropes. La seconde approche, dites Eulérienne, consiste à écrire les équations dans un référentiel mobile. Elles doivent alors être adaptées. L'approche Eulérienne pour l'étude du transport de neutrons pendant l'effondrement d'une étoile à neutrons a été reprise récemment [7, 35].

6.4 Présentation de Phénix et des essais de gerbage

Nous présentons ici le réacteur Phénix et les essais de gerbage qui ont été utilisés pour tester les méthodes présentées dans cette partie de la thèse. Une présentation complète du réacteur et des enseignements que l'on peut tirer de son exploitation peut être trouvée dans [47].

6.4.1 Phénix et les AURN

Phénix est un réacteur expérimental à neutrons rapides, refroidi au sodium, de 563MWth, construit dans les années 70 à Marcoule. Il a été arrêté définitivement en 2010. Le cœur du réacteur est composé de six couronnes d'assemblages fissiles (en plus de l'assemblage central), de deux de fertiles et de six de réflecteurs ou protections neutroniques, comme sur la figure 6.1.

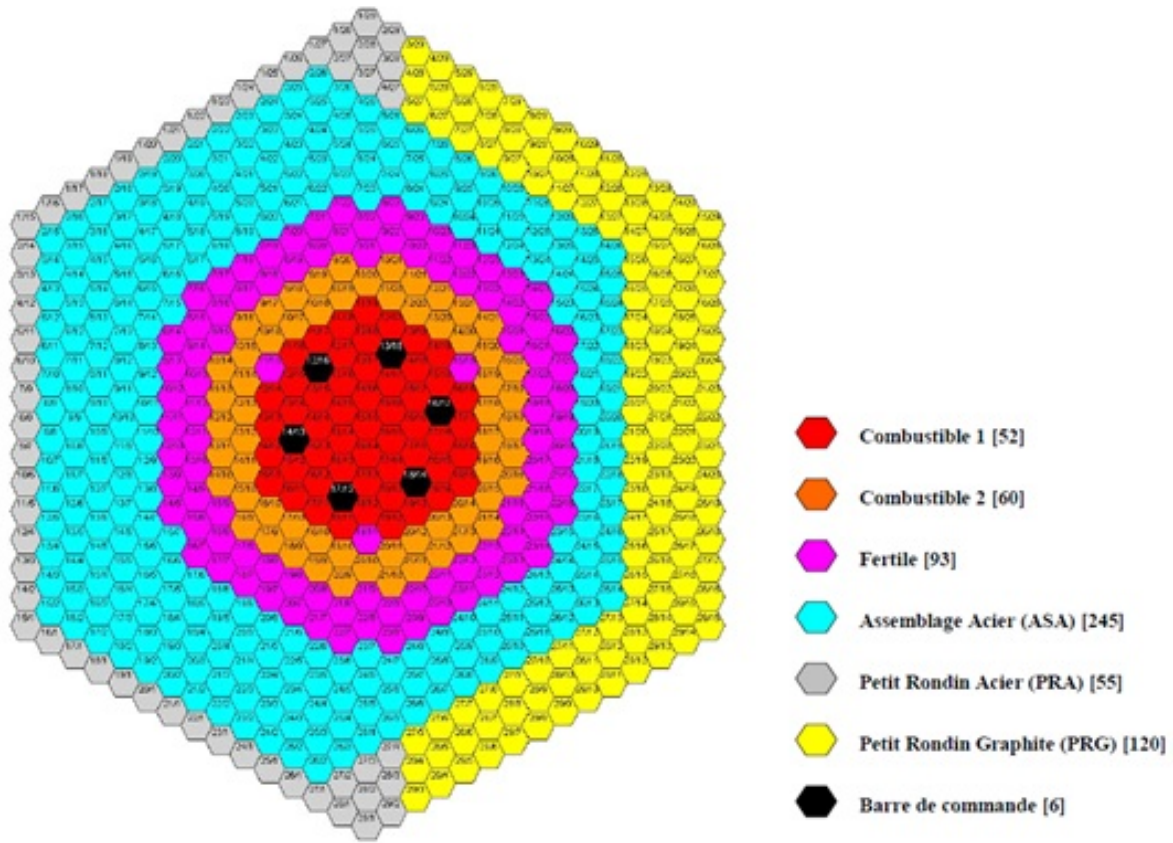


FIGURE 6.1 – Coupe radiale du cœur de Phénix. Illustration issue de [88]

Chaque assemblage (voir figure 6.2) est constitué d'un tube hexagonal en acier, rempli d'aiguilles cylindriques disposées selon un réseau hexagonal. Les aiguilles sont elles-mêmes constituées d'une gaine en acier contenant le combustible nucléaire sous la forme d'un oxyde mixte $(U/Pu)O_2$. Du sodium circule entre les aiguilles et entre les assemblages.

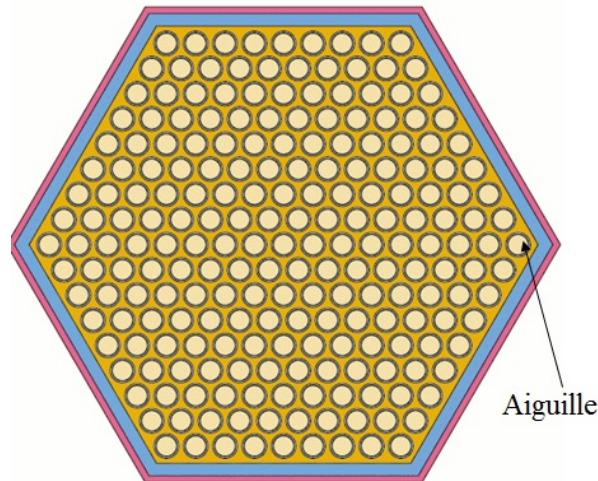


FIGURE 6.2 – Coupe radiale schématique d'un assemblage typique de RNR-Na

A la fin des années 90, le réacteur a connu 4 arrêts d'urgence par réactivité négative (ou AURN). Cela signifie que la réaction en chaîne a été arrêtée automatiquement parce qu'on a détecté une diminution non prévue de la puissance. Ces arrêts d'urgence sont intervenus pendant la montée en température du réacteur et un ébranlement des structures, ainsi qu'un pic de pression, auraient été mesurés dans le même temps. L'évolution du signal neutronique mesuré pendant un de ces AURN a été donnée figure 1.2. La puissance y chute brutalement, en 50ms, à 72% de sa valeur nominale, avant d'osciller avec une période d'environ 100ms. Les systèmes d'arrêt d'urgence interviennent à partir de 200ms et éteignent le réacteur.

Ces transitoires ne sont pas encore bien expliqués, mais on pense à l'heure actuelle qu'ils ont pu être causés par un déplacement des assemblages (voir par exemple [118, 119]).

6.4.2 Description des essais statiques et résultats expérimentaux

Pour avancer dans la compréhension des AURN, et pour pouvoir étudier le mouvement des assemblages de Phénix, tant du point de vue mécanique que de leur répercussion en neutronique, des expérimentations ont eu lieu en 2009 et 2013. En 2009, on a réalisé des gerbages statiques du cœur de Phénix, qui consistaient à remplacer un assemblage combustible par un dispositif écarteur, poussant sur les assemblages voisins. Des mesures de réactivité ont été faites en même temps. En 2013, des gerbages dynamiques ont été réalisés avec un effacement rapide du dispositif écarteur et une mesure des déplacements des assemblages pendant leur retour en position d'équilibre. Cette fois-ci cependant, aucune mesure neutronique n'a été réalisée pendant les essais. Nous nous sommes donc concentrés sur l'essai de gerbage statique qui nous a permis de nous confronter à l'expérience.

Soulignons le fait que les essais, qu'ils soient statiques ou dynamiques, ont été réalisés avec des assemblages combustibles qui avaient déjà servi, et qui étaient donc déformés du fait de leur irradiation. Ces déformations préalables aux essais sont mal connues mais sont susceptibles d'en influencer les résultats.

Nous reprenons ici les éléments du compte rendu de l'essai [38].

Trois configurations ont été étudiées pendant l'essai de gerbage statique :

1. Dispositif écarteur au centre, 350 ° C ;
2. Dispositif écarteur au centre, 180 ° C ;
3. Dispositif écarteur en 5eme couronne, 180 ° C.

Le même essai a été réalisé à deux températures différentes pour pouvoir prendre en compte différents états de compacité du cœur, causés par les dilatations différentielles du sommier et des boîtiers hexagonaux. Le cœur devrait ainsi être plus compact à 180 ° C qu'à 350 ° C.

La figure 6.3 illustre le type de modification de géométrie qu'induit un gerbage central. Le volume du cœur augmente, ce qui augmente les fuites neutroniques. On introduit également plus de sodium dans le cœur, ce qui améliore la modération. Ces deux effets vont dans le sens d'une diminution de réactivité.

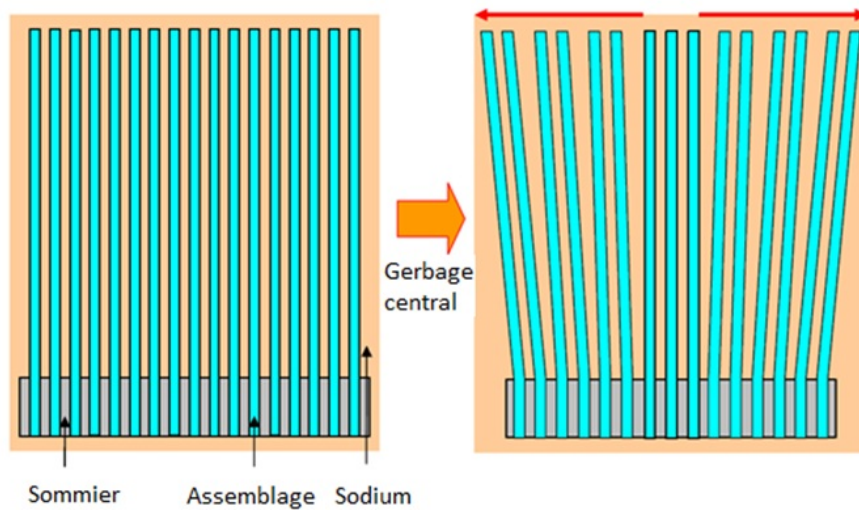


FIGURE 6.3 – Modification de la géométrie du cœur lors d'un gerbage central.

La figure 6.4 illustre le vocabulaire que nous utiliserons. Les tubes hexagonaux sont des structures en acier, fermées, qui contiennent les aiguilles de combustible. Sur ces tubes des petites plaquettes en acier ont été fixées à une hauteur donnée, pour empêcher les assemblages de se toucher et de gêner ainsi l'écoulement du sodium inter-assemblage. La distance nominale entre les plaquettes est ce que l'on nommera le jeu.

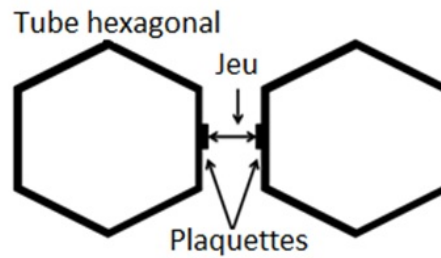


FIGURE 6.4 – Schéma de tubes hexagonaux.

On dispose de trois mesures :

1. Les efforts exercés par le dispositif écarteur ;
2. Les déplacements d'un assemblage de 5ème couronne ;
3. La réactivité.

Les efforts mesurés, par le dispositif écarteur, pendant la phase de chargement des gerbages centraux sont donnés, approximativement, en figure 6.5, en fonction du déplacement des plaquettes du dispositif écarteur. On constate qu'à déplacement donné, les efforts sont décroissants avec la température.

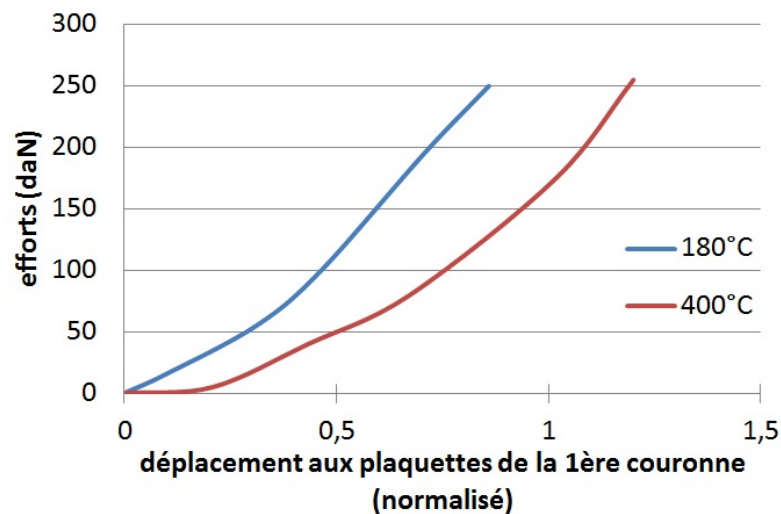


FIGURE 6.5 – Efforts mesurés pendant l'essai de gerbage statique central.

Les sonars mesurant les déplacements ont mal fonctionné, et on ne dispose que de mesures de déplacement d'un assemblage de 5ème couronne, et uniquement en configuration 1 et 3. On n'a donc pas de comparaison possible du même essai à deux températures différentes. Les mesures de déplacement de l'essai de gerbage central à 350 °C, sont données figure 6.6. On constate qu'il y a un certain retard à la transmission du mouvement entre la 1ère et la 5ème couronne, qui peut être interprété comme le délai de fermeture des jeux inter-assemblages.

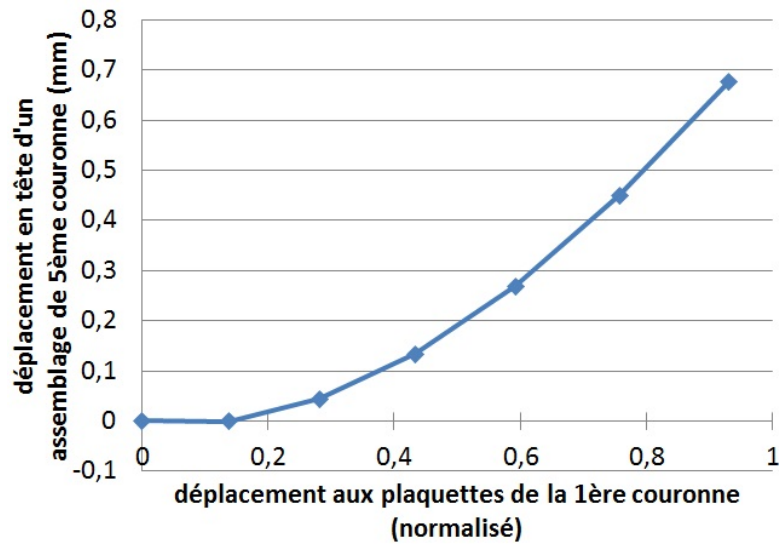


FIGURE 6.6 – Déplacement mesuré d'un assemblage de 5ème couronne pendant le gerbage statique à 350 °C.

Enfin, nous disposons de mesures de réactivité pour les trois configurations, en fonction du déplacement des plaquettes du dispositif écarteur, dont les tendances sont données figure 6.7. Comme on s'y attendait, l'effet du gerbage est négatif. Le comportement semble asymptotiquement linéaire, avec une phase de transition où l'effet est moindre. Contrairement à ce qu'on pouvait penser, l'effet en réactivité est proche à 350 °C et à 180 °C. Il semble donc que la compacité du cœur n'ait pas beaucoup changé, bien que les efforts mesurés diminuent avec la température.

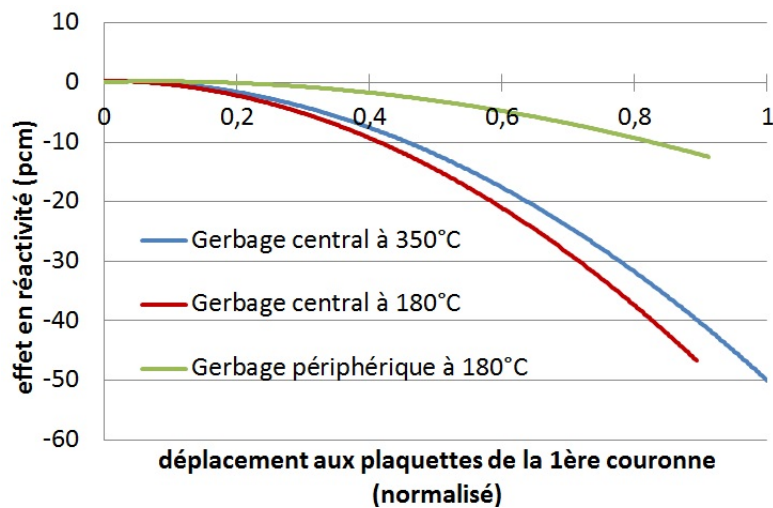


FIGURE 6.7 – Mesures de réactivité des essais de gerbage statique.

Déformation de géométrie à maillage fixe avec APOLLO3®

Ce chapitre est dédié à la présentation d'une méthode dite de pixellisation, qui permet de modéliser un cœur déformé avec un maillage de calcul fixe et régulier. Cela permet d'utiliser les codes métiers de neutronique (APOLLO3® dans notre cas) qui imposent généralement la régularité du maillage.

Ce chapitre est divisé en trois sections. La section 7.1 traite du déplacement de la matière, ce qui permet de définir des sections efficaces macroscopiques représentatives de la déformation. La section 7.2 est consacré à la problématique du déplacement des précurseurs de neutrons retardés pendant un calcul cinétique. Enfin la section 7.3 applique ces méthodes aux essais de gerbage de Phénix.

7.1 Déplacement de la matière

7.1.1 Présentation de la méthode

L'objectif ici est de construire et d'utiliser une méthode de pixellisation du cœur pour déplacer la matière. Les pixels constituent un maillage de calcul fixe sur lequel est projetée la géométrie, possiblement déformée, du cœur. Les compositions sont homogénéisées sur chaque pixel, ce qui en fait une méthode orientée RNR. Le grand libre parcours moyen des neutrons dans ces réacteurs permet en effet l'utilisation de géométries homogénéisées. Des travaux similaires avaient déjà été entrepris lors de précédents stages [69, 73, 61]. Le travail présenté ici s'est directement appuyé sur celui de Carolina Labarta [61] et a été publié dans [83].

Nous utilisons MedCoupling, module de Salomé [90], pour construire la représentation pixelisée du cœur, qui est ensuite importée dans APOLLO3®.

La suite de cette sous-section est divisée en quatre paragraphes. Le paragraphe a. présente les calculs d'autoprotection, effectué avec ECCO, un module d'ERANOS. Les sections efficaces sont paramétrées par la quantité de sodium inter-assemblage autour de l'assemblage. Le paragraphe b. présente la modélisation de la déformation du cœur. La pixellisation de cette géométrie déformée est présentée au paragraphe c.. Enfin le paragraphe d. traite de l'importation de ces informations dans APOLLO3®.

a. Autoprotection par ECCO

La première étape est la génération des sections efficaces auto-protégées avec ECCO. Les options de ces calculs dépendent des cas considérés (voir la section sur les données utilisées 6.2).

Pour pouvoir tenir compte des effets d'autoprotection liés au changement du spectre neutronique lors de variations locales de la fraction de sodium, nous générons des sections efficaces paramétrées par la quantité de sodium inter-assemblage. Nous introduisons donc un paramètre nommé "dilution" que l'on notera avec un d en exposant. d est directement égal à la fraction de la cellule occupée par du sodium inter-assemblage. Nous appellerons d_{ref} la valeur de la dilution pour une cellule non déformée.

Pour obtenir ces sections paramétrées nous faisons plusieurs calculs ECCO pour chaque milieu en faisant varier la taille des cellules et en adaptant les concentrations des matériaux pour conserver les quantités de matière. Si nous notons C une concentration donnée et S la section de la cellule de calcul on a :

$$C^{(d)} = C^{(d_{ref})} \frac{S^{(d_{ref})}}{S^{(d)}}.$$

b. Déformation de la géométrie

Les déformations des assemblages sont obtenues par des calculs d'interaction fluide-structure par CAST3M. Elles sont exprimées en déplacement radiaux du centre de tous les assemblages à différentes hauteurs (les déplacements n'ont pas de composante axiale). Le fluide, dont l'impact ne se voit qu'en dynamique, diminue les fréquences des vibrations des assemblages, couple leurs déplacements, et introduit des dissipations d'énergie supplémentaires.

A partir de ces résultats, nous créons, avec MedCoupling, une géométrie déformée, déjà interpolée axialement pour correspondre au maillage neutronique (figure 7.1). Dans notre cas, cette géométrie est constituée de prismes droits à base hexagonale qui sont translatés radialement (figure 7.2). Nous attribuons alors à cette géométrie des champs d'identification de milieux. Notons que les pavés représentant les assemblages n'intègrent pas le sodium inter-assemblage, contrairement aux cellules ECCO.

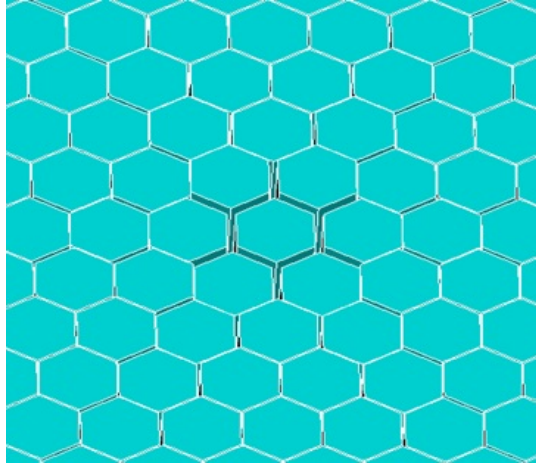


FIGURE 7.1 – Géométrie déformée, lors d'un essai de gerbage central, générée avec MedCoupling. Visualition avec Salomé.

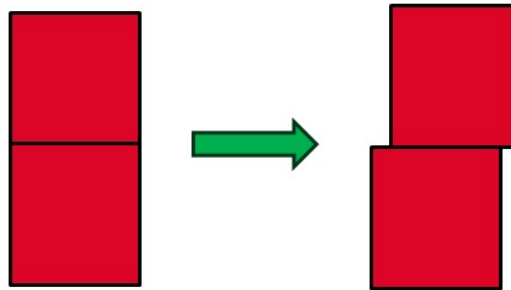


FIGURE 7.2 – Schéma de la déformation de la géométrie générée avec MedCoupling.

c. Construction de la pixellisation

Les champs d'identification des milieux obtenus précédemment sont ensuite projetés sur des pixels de taille prédéfinie. On obtient ainsi les fractions volumiques des matériaux sur les pixels. La fraction de sodium inter-assemblage est déduite en calculant le complément à 1 de la somme des fractions volumiques, et sa concentration est obtenue en supposant une température homogène de l'inter-assemblage dans le cœur. Une illustration des champs obtenus est donnée figure 7.3. Sur la figure et dans la suite les pixels utilisés sont hexagonaux.

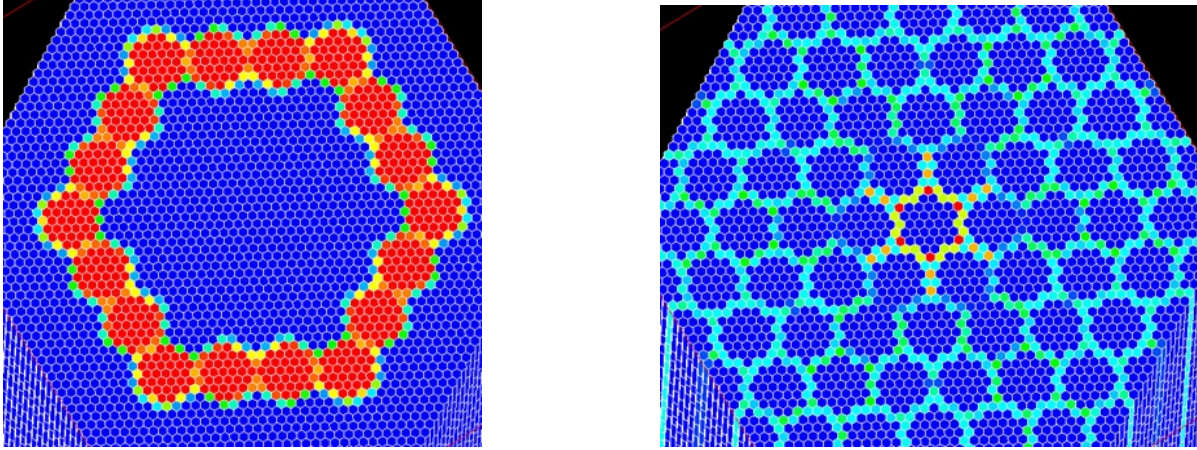


FIGURE 7.3 – Projections sur les pixels du milieu constituant les assemblages de la troisième couronne à gauche, et celui, lors d'un gerbage central, du sodium inter-assemblage à droite. Visualisation avec Salomé.

Pour pouvoir importer les sections efficaces auto-protégées par ECCO, il faut connaître, sur chaque pixel, la valeur du paramètre dilution. Pour cela, on va chercher à moyenner la quantité de sodium inter-assemblage à l'échelle de l'assemblage, puisque c'est l'ordre de grandeur du libre parcours moyen des neutrons. Nous introduisons, dans cet objectif, un maillage reliant entre eux les centres des assemblages, après déplacement (voir schéma figure 7.4, à gauche). Le champ contenant la quantité de sodium inter-assemblage est projeté sur ce maillage, avant d'être projeté à nouveau sur les pixels (figure 7.4, à droite).

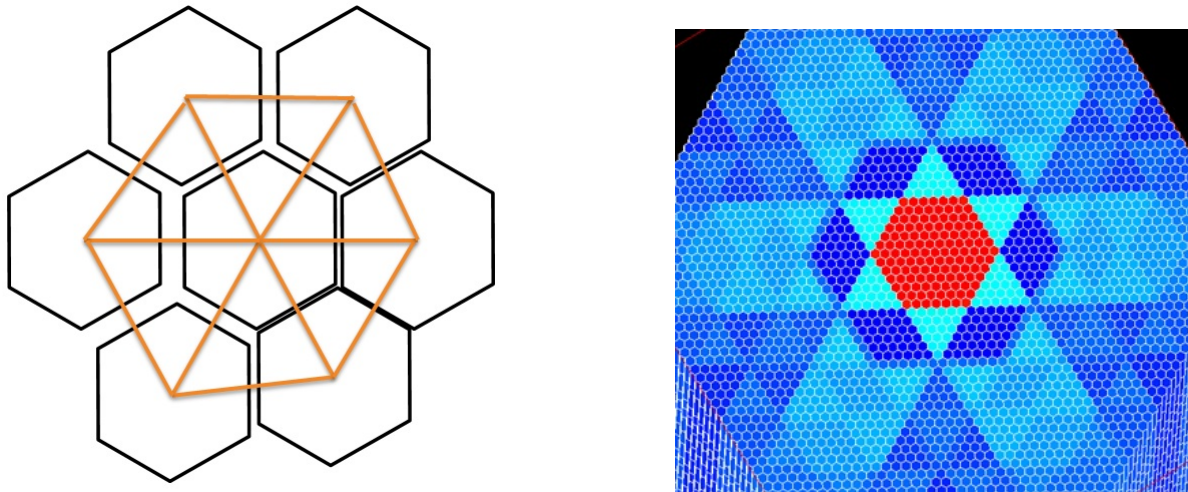


FIGURE 7.4 – Maillage intermédiaire utilisé pour calculer la dilution à gauche, champ de dilution, lors d'un gerbage central, projeté sur les pixels à droite. Visualisation Salomé pour l'image de droite.

d. Importation de ces informations dans APOLLO3®

Chaque pixel contient maintenant à la fois les fractions volumiques des différents matériaux et une valeur de dilution. Pour lancer un calcul, il est donc nécessaire de mélanger les matériaux dans chaque pixel. S'il est possible de le faire dans APOLLO3® en définissant des milieux dans la phase d'initialisation, on ne peut pas changer ces définitions pendant un calcul neutronique, ce qui est indispensable à notre application.

Mélanger des matériaux revient à calculer, sur chaque pixel, des sections efficaces macroscopiques en moyennant celles des matériaux pondérées par les fractions volumiques (X_m fraction volumique du milieu m , $\sigma_{macro\ m}^{(d)}$ section efficace macroscopique du milieu m pour une dilution d) :

$$\sigma_{macro\ tot}^{(d)} = \sum_{m(matériaux)} X_m \sigma_{macro\ m}^{(d)}.$$

APOLLO3® peut recalculer à tous moments ses sections efficaces macroscopiques, qui sont une somme des sections efficaces microscopiques pondérées par les concentrations (C_i concentration de l'isotope i , σ_i sa section efficace microscopique) :

$$\sigma_{macro} = \sum_{i(sotopes)} C_i \sigma_i.$$

On contourne donc notre difficulté en créant un pseudo-matériau supplémentaire, constitué de macro-isotopes représentant chacun l'un des matériaux initiaux à mélanger. Les sections efficaces microscopiques des macro-isotopes sont identifiées aux sections efficaces macroscopiques des matériaux, et les fractions volumiques des matériaux jouent le rôle des concentrations de ces macro-isotopes. Une fois ce pseudo-matériau défini, il suffit d'importer la carte des fractions volumiques comme une carte de concentration pour définir notre géométrie.

Notons néanmoins que, comme les cellules ECCO contiennent le sodium inter-assemblage et que notre description de la géométrie déformée en tient compte séparément, il faut, lors du calcul des sections efficaces macroscopiques des matériaux, utiliser les concentrations sans sodium inter-assemblage :

$$\sigma_{macro\ m}^{(d)} = \sum_{i(sotopes)} C_i^{(d=0)} \sigma_i^{(d)}. \quad (7.1)$$

Il est également nécessaire de rajouter un matériau supplémentaire pour décrire le sodium inter-assemblage. Se pose alors la question du choix des sections efficaces microscopiques à retenir. Nous choisissons simplement de récupérer les sections du sodium autoprotégées dans un matériau arbitraire.

Une valeur moyenne du paramètre χ , donnant la répartition énergétique des neutrons de fission, doit également être calculée sur chaque pixel. χ n'étant pas une section efficace, son traitement est différent. Il est obtenu comme une moyenne des χ de chaque isotope (ou macro-isotope) pondérée par le taux de création de neutrons de fission (X_m fraction volumique du matériau m , $\nu \sigma_m^{g'(d)}$ section efficace de création de neutrons de fission du groupe d'énergie g' , dans le matériau m et pour la dilution d , $\phi^{g'}$ flux neutronique du groupe d'énergie g') :

$$\chi_{global}^{g(d)} = \frac{\sum_{g'} \sum_m \chi_m^{g(d)} X_m \nu \sigma_m^{g'(d)} \phi^{g'}}{\sum_{g'} \sum_m X_m \nu \sigma_m^{g'(d)} \phi^{g'}}.$$

On démontre facilement qu'avec cette formule, la somme sur les groupes d'énergie des χ reste égale à 1 :

$$\sum_g \chi_{global}^g = \frac{\sum_{g'} \sum_m \left(\sum_g \chi_m^{g(d)} \right) X_m \nu \sigma_m^{g'(d)} \phi^{g'}}{\sum_{g'} \sum_m X_m \nu \sigma_m^{g'(d)} \phi^{g'}} = 1.$$

Le calcul du χ moyen demande donc de connaître le flux neutronique. On récupère généralement le flux obtenu lors de l'autoprotection du matériau dont on calcule les paramètres neutroniques. Notre pseudo-matériau n'ayant pas été autoprotégé, il est nécessaire de lui associer un flux neutronique. On choisit, là encore, un matériau de façon arbitraire et récupérons le flux qui a été utilisé pour l'autoprotéger.

Une fois ce travail préliminaire fait, il est facile d'importer la géométrie des pixels (régulière et fixe), les concentrations des macro-isotopes et le paramètre dilution pour définir notre calcul.

Les résultats présentés dans la suite de cette partie ont tous été obtenus en diffusion, avec 33 groupes d'énergie.

7.1.2 Evaluation de la méthode

a. Etude de l'impact de la taille des pixels et des biais identifiés

Nous appliquons ici notre démarche sur Phénix, avec des compositions isotopiques de cœur neuf, comme expliqué section 6.2. Nous comparons les résultats à un calcul dit de référence, fait avec le même solveur et les mêmes sections efficaces mais avec une description classique de la géométrie, et sans pixel. La géométrie est décrite axialement du pied d'assemblage jusqu'à la tête, et radialement jusqu'à la deuxième couronne de réflecteurs. A chaque fois, nous donnons la réactivité du cas considéré ainsi que l'effet en réactivité d'une déformation donnée (un gerbage central de forte amplitude calculé en supposant les jeux inter-assemblages initialement comblés : voir paragraphe 6.4 pour plus de détails).

Rappelons que les pixels sont hexagonaux. Nous avons commencé par créer des pixels de taille identique aux assemblages (soit avec un entreplat, distance entre deux côtés parallèles, de 12.72cm), de manière à avoir exactement le même maillage que le calcul de référence. Ensuite, nous avons changé le matériau donnant les sections efficaces du sodium inter-assemblage, puis celui donnant le flux utilisé pour calculer les χ finaux. Dans les deux cas, nous sommes passés d'un matériau fissile à un matériau fertile. Enfin nous avons diminué la taille des pixels. Les résultats sont donnés tableau 7.1. La dimension donnée pour les pixels correspond à leur entreplat.

Cas	Nombre de mailles	Réactivité (pcm)	Effet en réactivité d'une déformation (pcm)
Référence	10592	1498	
Pixels de 12.72cm	10592	1495	-14
Pixels de 12.72cm, matériau Na changé	10592	1497	-14
Pixels de 12.72cm, matériau χ changé	10592	1495	-14
Pixels de 6.0cm	40352	1519	-188
Pixels de 3.0cm	165344	1593	-183
Pixels de 2.0cm	387104	1708	-184
Pixels de 1.5cm	685472	1832	-193
Pixels de 1.0cm	1536224	1821	-207

TABLEAU 7.1 – Vérification de la méthode de pixellisation sur Phénix.

On observe des résultats très proches entre la référence et le calcul avec des pixels de 12.72cm. La faible différence peut être attribuée soit à l'utilisation de sections efficaces microscopiques homogènes pour le sodium inter-assemblage dans tout le cœur, soit à la précision du solveur. Cela semble indiquer que notre méthode a été développée sans erreur. Les biais identifiés, le choix des sections efficaces microscopiques pour le sodium inter-assemblage et celui du flux pour le calcul de χ semblent, quant à eux, négligeables.

Lorsque la taille des pixels diminue, la réactivité tend à augmenter, ce qui est dû au fait que le sodium inter-assemblage, homogénéisé dans le calcul de référence, est progressivement extrait des assemblages. Il est donc moins susceptible d'absorber ou de modérer les neutrons, ce qui explique l'augmentation de réactivité. En revanche, on voit que l'effet en réactivité d'une déformation, c'est à dire la différence entre la réactivité calculée sur la géométrie déformée et celle calculée sans déformation, est relativement stable avec la taille des pixels. L'augmentation de l'effet en réactivité de la déformation pour les pixels petits est probablement un biais, dû à la description qui est alors faite des interfaces horizontales entre les assemblages et le sodium inter-assemblage, introduites par la façon de générer la géométrie déformée (voir figure 7.2).

Nous avons utilisé pour la suite des pixels de 3cm. A titre d'illustration, nappe de puissance et flux monogroupe obtenus pour le cas non déformé sont donnés figure 7.5.

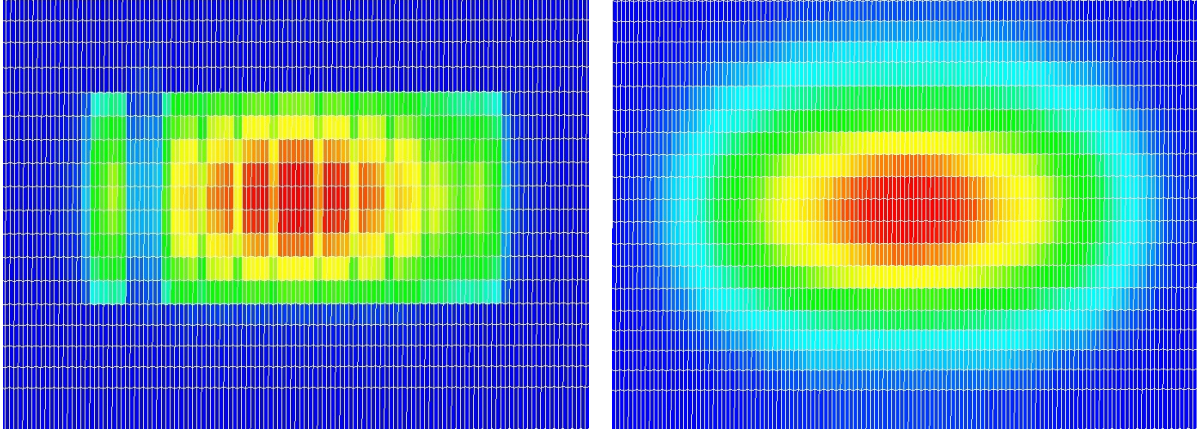


FIGURE 7.5 – Coupes radiales de la nappe de puissance et du flux monogroupe obtenues sur la géométrie non déformée de Phénix. Visualisation avec Salomé.

b. Validation par comparaison avec TRIPOLI-4

La même déformation a été calculée avec notre méthode et avec TRIPOLI-4. Il s'agit d'un essai de gerbage central du cœur, avec des jeux inter-assemblages initialement comblés (voir paragraphe 6.4), pour lequel on a calculé 4 états différents. Les compositions sont celles d'un cœur évolué (voir paragraphe 6.2). La comparaison est visible figure 7.6. Les calculs de TRIPOLI-4 sont donnés avec une marge d'incertitude de 3σ . On constate une bonne cohérence entre les résultats, ce qui conforte la validité de notre méthodologie. Chaque calcul de TRIPOLI-4 a pris 48h sur 256 processeurs contre environ 30min sur un processeur pour les calculs d'APOLLO3®. Pour plus de détails sur la mise en place du modèle de géométrie déformée dans TRIPOLI-4, voir l'annexe A qui reprend les éléments de [61, 60].

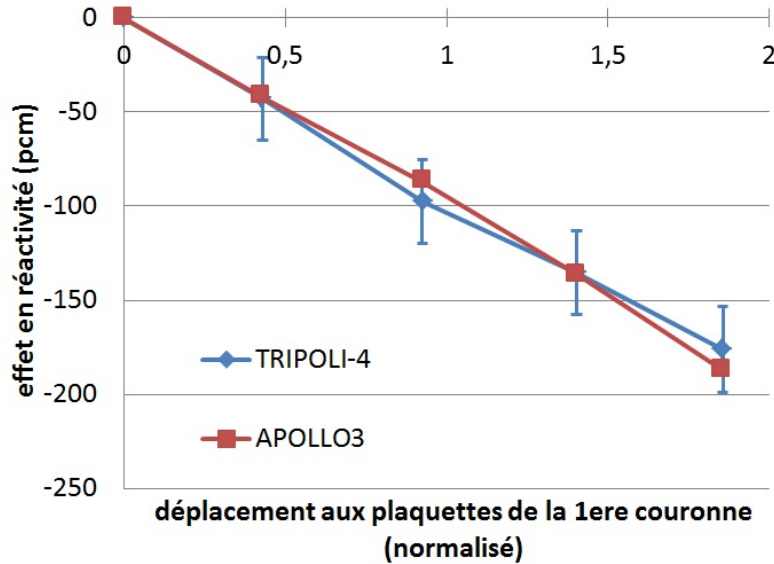


FIGURE 7.6 – Comparaison d'effets en réactivité obtenus par TRIPOLI-4 et APOLLO3®.

Des comparaisons entre des effets en réactivité obtenus sur d'autres types de déformations par TRIPOLI-4 et APOLLO3® peuvent être trouvées dans l'annexe B.

7.1.3 Quelques études pour tenter d'identifier les effets importants

a. Evaluation de l'effet d'autoprotection

Pour évaluer l'effet d'autoprotection, nous avons calculé l'impact d'une perturbation géométrique (un essai de gerbage central de forte amplitude avec des jeux inter-assemblages initialement comblés, voir 6.4) deux fois. La première fois, le calcul est fait en utilisant la méthode précédemment exposée (paragraphe 7.1.1) pour mettre à jour le champ dilution. La seconde fois, le champ dilution nominal est utilisé. Dans les deux cas, on utilise des concentrations de cœur neuf (voir paragraphe 6.2).

La figure 7.7 donne une illustration de la quantité de sodium inter-assemblage en tête d'assemblage lors de cette déformation, sur des pixels de 3cm. L'écartement est visible, ainsi que les contacts entre les assemblages des six diagonales du cœur. Rappelons que le champ de dilution est obtenu en moyennant le champ de sodium inter-assemblage. Il est donc ici maximum au centre et minimum sur les axes de déformation où les assemblages se touchent (comme sur l'image de droite de la figure 7.4).

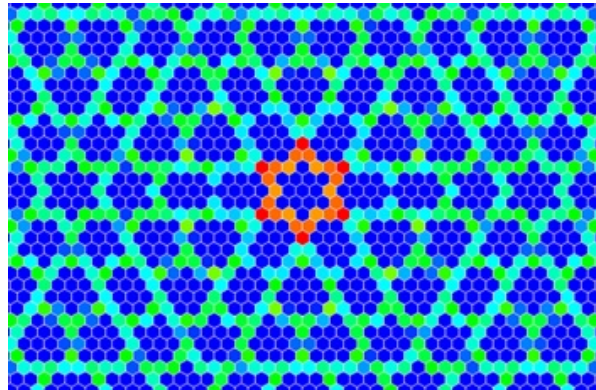


FIGURE 7.7 – Champ donnant les fractions volumiques de sodium inter-assemblage, lors d'un essai de gerbage, sur des pixels de 3cm. Visualisation avec Salomé.

Les deux effets en réactivité sont donnés tableau 7.2. On constate que l'effet d'autoprotection est faible ($\approx 1.6\%$ ici), mais que ne pas le prendre en compte revient à sous-estimer légèrement l'effet en réactivité du gerbage.

Cas	Effet en réactivité (pcm)
Avec dilution perturbée	-183
Avec dilution nominale	-180

TABEAU 7.2 – Evaluation de l'importance de l'autoprotection dans l'effet en réactivité d'un gerbage central.

b. Evaluation de l'effet de spectre

Nous avons souhaité connaître l'impact de la thermalisation du flux neutronique sur l'effet en réactivité d'une déformation géométrique. Pour cela nous avons calculé la variation de

réactivité liée à une perturbation géométrique donnée (un essai de gerbage central de faible amplitude avec des jeux inter-assemblages initialement comblés, voir 6.4), sur 5 cas, où on a remplacé respectivement 0%, 25%, 50%, 75% et 99% des atomes de sodium par des molécules d'eau. Nous avons travaillé à chaque fois avec des concentrations de cœur neuf (voir 6.2). A titre d'illustration, la figure 7.8 donne les spectres d'autoprotection du milieu fissile pour les deux cas extrêmes. Il est visible que l'introduction d'eau décale légèrement le flux neutronique vers les basses énergies, mais qu'il reste globalement rapide. Ceci est dû à la géométrie des assemblages qui minimise la quantité de caloporteur justement pour réduire l'effet de modération. L'utilisation d'un combustible neuf à base de plutonium accentue encore la dureté du spectre neutronique.

Les résultats sont donnés tableau 7.3. L'introduction d'un modérateur diminue la réactivité du cœur, ce qui est normal sur un réacteur à neutrons rapides. En outre, l'effet en réactivité diminue quand on rajoute de l'eau. En effet, la thermalisation du spectre réduit le libre parcours moyen des neutrons, et donc les fuites ainsi que l'impact de leur augmentation suite à la déformation.

Cas	Reactivité nominale (pcm)	Effet en réactivité (pcm)
100% sodium, 0% eau	1266	-41
75% sodium, 25% eau	-1373	-33
50% sodium, 50% eau	-2410	-30
25% sodium, 75% eau	-3048	-24
1% sodium, 99% eau	-3302	-15

TABLEAU 7.3 – Effet de la déformation de la géométrie en fonction de la thermalisation du spectre.

Lorsqu'on rajoute de l'eau, le libre parcours moyen diminuant, on peut s'attendre à l'inverse à un impact local plus fort de la perturbation. Pour visualiser cet effet, on montre, figure 7.9, les nappes 3D de variation du flux monogroupe (somme des flux de chaque groupe) pour les deux cas extrêmes. Les échelles de couleur sont les mêmes, le orange correspond à une variation nulle, les couleurs plus froides à une diminution du flux, et le rouge à une augmentation. On constate qu'effectivement, le flux est localement beaucoup plus perturbé quand on modère que dans le cas nominal, bien que l'effet sur la réactivité, paramètre global, soit plus faible.

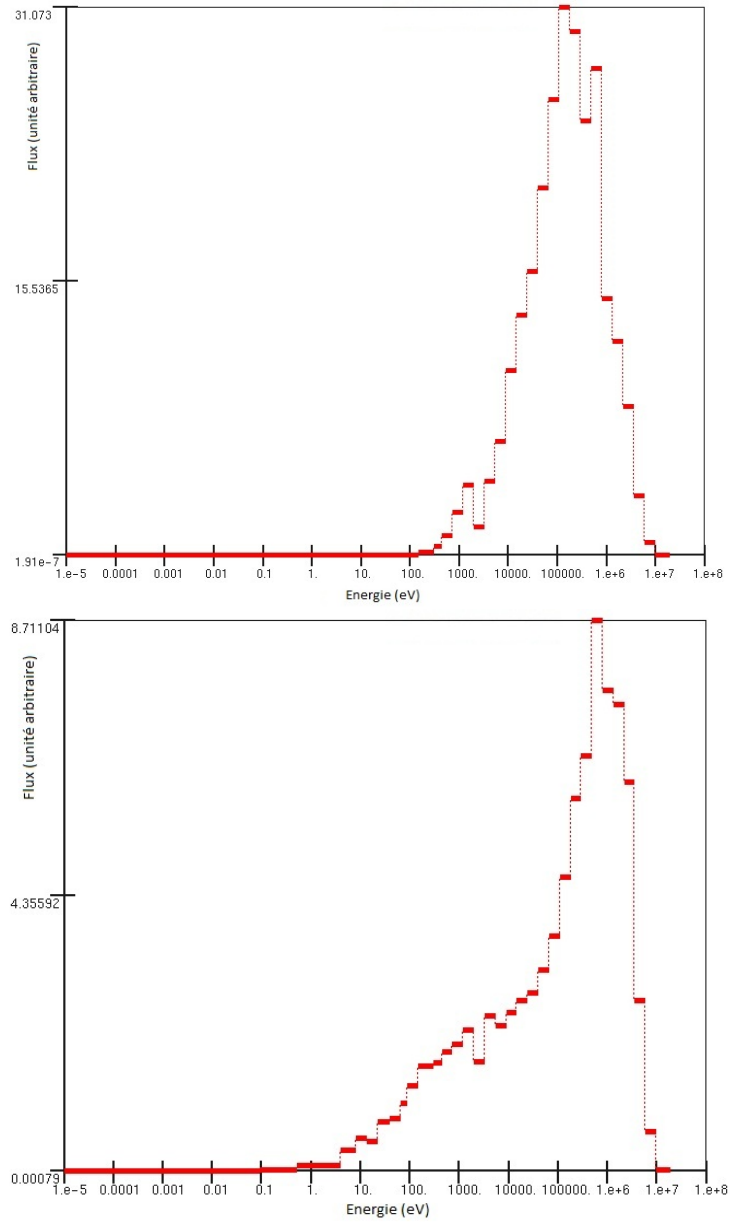


FIGURE 7.8 – Spectres d'autoprotection de la zone fissile du cœur interne de Phénix (neuf), avec uniquement du sodium en haut, et en remplaçant 99% du sodium par de l'eau en bas.

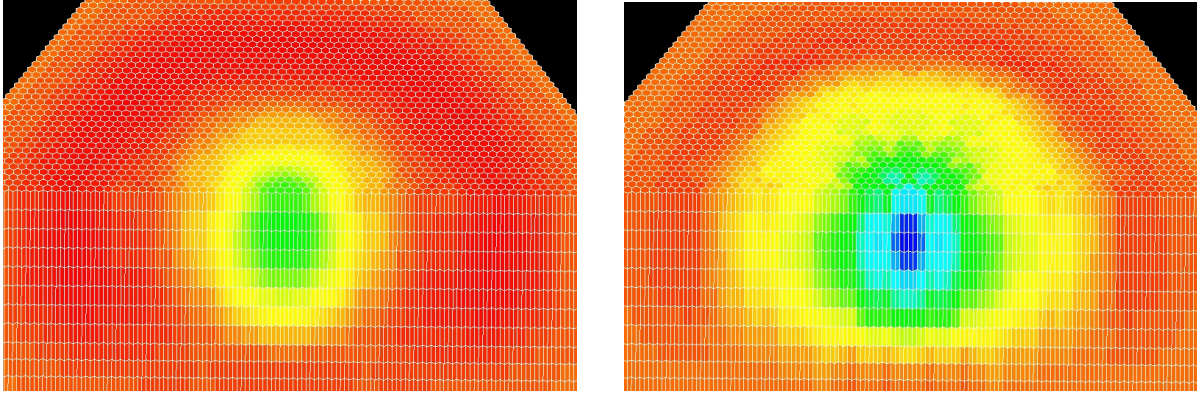


FIGURE 7.9 – Carte de variation du flux monogroupe lors d’un gerbage central, dans le cas normal (à gauche) et lorsque 99% du sodium a été remplacé de l’eau (à droite). Visualisation avec Salomé.

Le fait qu’une perturbation, dans un réacteur à neutrons rapides, ait un impact global plutôt que local tend à montrer que seule une déformation cohérente du cœur peut mener à un effet notable. En revanche, si le spectre est thermalisé (que cela soit sur l’ensemble du réacteur ou localement), il est possible de perturber fortement le comportement neutronique local du cœur sans que cela ne soit visible sur le comportement intégré (puissance) du cœur. Ainsi, selon le spectre, l’enjeu de la compréhension des déformations du cœur est différent. Dans un réacteur à neutrons rapides, il est nécessaire de comprendre et d’anticiper les causes de déformations cohérentes du cœur qui peuvent affecter le cœur dans son ensemble. Un réacteur à eau est moins sensible aux déformations cohérentes du cœur, mais le risque de déformer localement le flux neutronique par une perturbation locale des caractéristiques du cœur est plus fort. Cela peut mener à un accident (rupture de gaines par exemple) difficile à détecter.

c. Etudes de l’impact de déformations hétérogènes

Il est couramment avancé, dans les études sur les AURN de Phénix, que l’effet en réactivité d’une déformation est principalement lié à la variation du diamètre moyen du cœur au Plan Médian Coeur (PMC). En outre, les études précédentes de cœurs déformés négligeaient généralement les courbures des assemblages. L’outil développé ici permet de vérifier ces hypothèses. Nous avons étudié pour cela quatre déformations académiques du cœur de Phénix (concentrations non évoluées, voir paragraphe 6.2) :

1. Configuration 1, dite « homogène inclinée » : La tête de chaque assemblage est déplacée vers l’extérieur du cœur d’un nombre de millimètres égal à son numéro de couronne (1mm pour les assemblages de la première couronne, 2mm pour ceux de la 2eme etc.), tandis que le pied reste fixe. Les déplacements sont interpolés linéairement entre les deux.
2. Configuration 2, dite « homogène droite » : Chaque assemblage est translaté vers l’extérieur de manière à obtenir le même déplacement moyen de la zone fissile que dans la configuration 1.
3. Configuration 3, dite « hétérogène inclinée » : La tête de chaque assemblage est déplacée vers l’extérieur du cœur d’un nombre de millimètres égal à 5 moins son numéro de couronne (4mm pour les assemblages de la première couronne, 3mm pour ceux de la

2eme etc.), tant dis que le pied reste fixe. Les déplacements sont interpolés linéairement entre les deux.

4. Configuration 4, dite « hétérogène droite » : Chaque assemblage est translaté vers l'extérieur de manière à obtenir le même déplacement moyen de la zone fissile que dans la configuration 3.

Ces déformations sont schématisées figure 7.10.

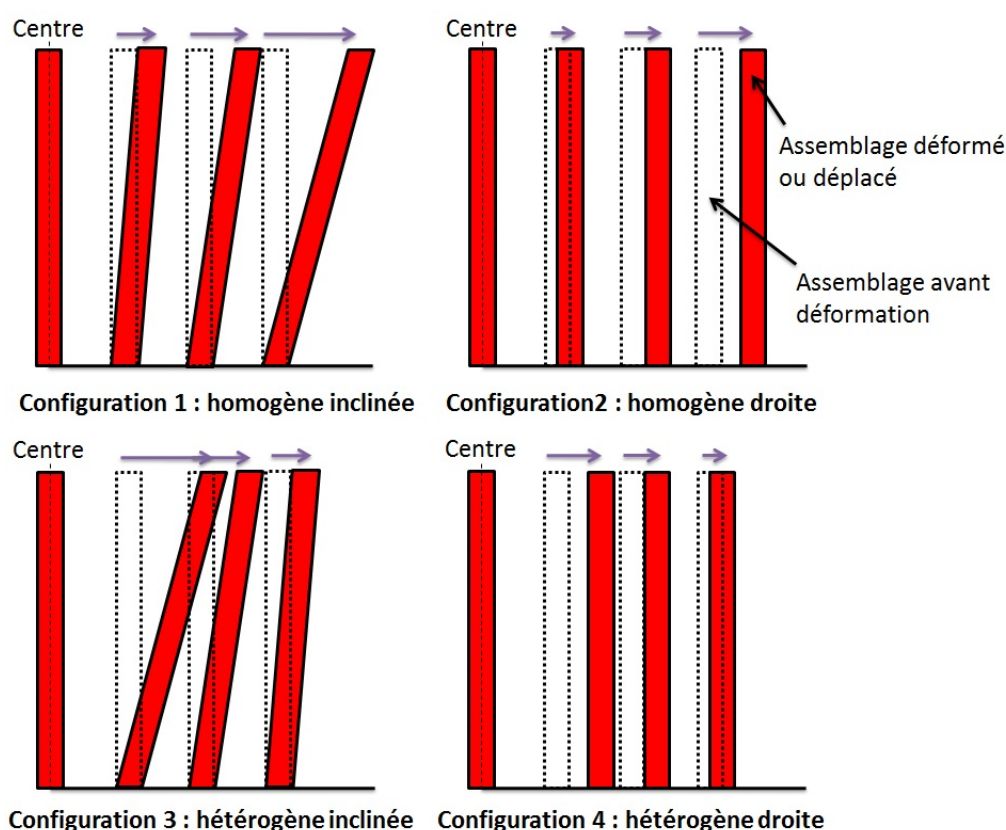


FIGURE 7.10 – Schémas des déformations académiques du cœur de Phénix étudiées.

Les résultats, obtenus en quart de cœur, sont regroupés tableau 7.4. Le déplacement moyen étant plus important dans les configurations homogènes, pour permettre les comparaisons, on donne dans la dernière colonne l'effet en réactivité par millimètre moyen de déplacement des zones fissiles. On constate que l'inclinaison des assemblages peut effectivement être négligée. En outre, les déformations homogènes ont un effet en réactivité plus fort que les déformations hétérogènes. Au premier ordre, cela est dû au fait que les assemblages en périphérie du cœur sont dans une zone où les gradients du flux et de la fonction importance (voir paragraphe 6.3.1) sont plus forts qu'au centre, et que leur déplacement apporte donc une contribution plus forte à la diminution de réactivité (voir équation (6.5)).

Cas	Effet en réactivité (pcm)	Effet en réactivité moyenné (pcm/mm)
Déformation homogène droite	-219	-1.40
Déformation homogène inclinée	-219	-1.40
Déformation hétérogène droite	-23	-0.40
Déformation hétérogène inclinée	-23	-0.40

TABLEAU 7.4 – Etude de l’impact de l’hétérogénéité d’une déformation sur son effet en réactivité.

7.2 Déplacement des précurseurs de neutrons retardés

7.2.1 Présentation de la méthode

a. La problématique

Pendant un calcul cinétique, l’équation du flux est couplée avec celle régissant la décroissance des précurseurs de neutrons retardés, donnée ci-dessous (t est le temps, C_l la concentration du groupe de précurseurs l , λ_l sa constante de désintégration, β_l la fraction de neutrons de fissions libérée après décroissance d’un précurseur l , $\nu\sigma_f^g$ la section efficace macroscopique de création de neutrons par fission du groupe g , ϕ^g le flux neutronique du groupe g) :

$$\frac{\partial C_l}{\partial t} = -\lambda_l C_l + \sum_g \beta_l \nu \sigma_f^g \phi^g.$$

Les précurseurs de neutrons retardés sont ainsi créés par les fissions et, sans traitement particulier, restent, pendant la simulation, dans la maille de calcul (le pixel) où ils sont apparus. Cela n’est pas vrai physiquement, ils devraient se déplacer avec la matière. Les concentrations des précurseurs, déterminées par le code de neutronique, sont malheureusement connues sur les pixels constituant le maillage de calcul et non sur la géométrie physique subissant les déformations, ce qui complexifie leur déplacement. On va néanmoins présenter une méthode qui permet de reconstruire leur localisation sur la géométrie physique, et d’ainsi de les suivre avec précision. On commence par identifier la provenance (pixel d’origine) de la matière fissile homogénéisée dans chaque pixel pendant le calcul. On utilise ensuite cette information pendant le calcul cinétique pour distinguer les précurseurs en fonction de leur pixel d’origine.

b. Suivi du déplacement de la matière

On commence par projeter le maillage pixellisé sur les cellules représentant les assemblages en situation de référence, c’est à dire sur le cœur non déformé. On déplace ensuite les assemblages ainsi remaillés, ce qui permet de se « souvenir » d’où provient la matière déplacée. Enfin, on projette chaque maille sur le maillage de pixels non déplacés utilisé par le calcul. Pour gagner du temps de calcul, on extrait, avant projection, le nombre minimum de mailles susceptibles d’intervenir. Par exemple, si les déplacements sont dans le plan horizontal et sont plus petits que le plus petit côté d’un pixel, un maillage cible de 7 pixels suffit (un pixel et ses voisins dans le plan horizontal). C’est précisément cette hypothèse que l’on a retenue. La figure 7.11 illustre la démarche.

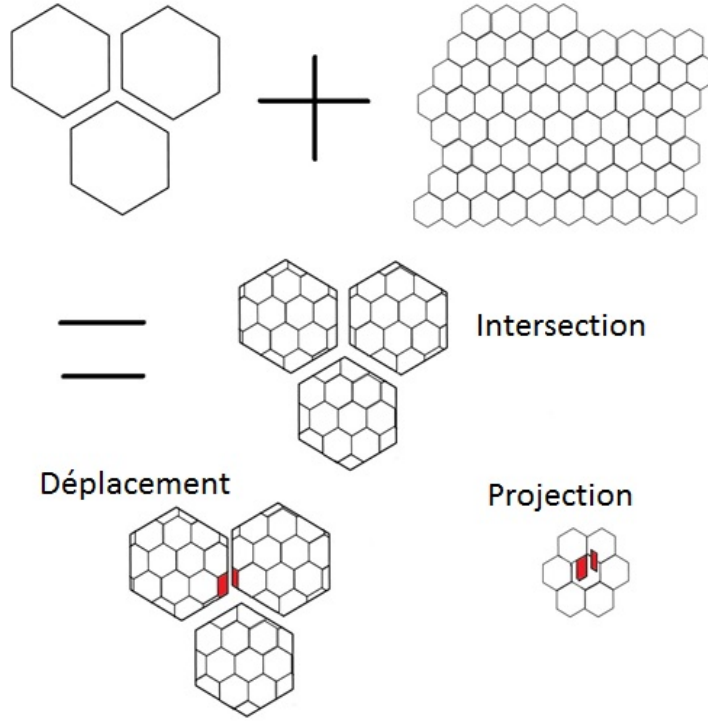


FIGURE 7.11 – Schéma de la détermination de la provenance de la matière dans chaque pixel.

Ce calcul nous donne les fractions volumiques d'intersection, après déplacement, de chaque pixel avec ses voisins, que l'on note X_j^i . i désigne le pixel de calcul, et j celui de provenance de la matière. On normalise ensuite ces valeurs de façon à ce que $\sum_i X_j^i = 1$, ce qui n'est pas vérifié a priori à cause de l'espace inter-assemblage. X_j^i devient alors la fraction volumique de matière d'assemblage de la maille i en provenance de j .

c. Modification du calcul cinétique

En plus des X_j^i , on note le vecteur (indiqué sur les groupes d'énergie) donnant la production de précurseurs l en configuration de référence à la maille i : $(\beta_l \nu \sigma_f^g)_{ref}^i$. On suppose également que l'on dispose des concentrations de chaque précurseur ramenées en configuration de référence, au pas de temps précédent, que l'on note $C_l^{i, ref}$ pour la maille i .

Pendant le calcul cinétique, on duplique les précurseurs en fonction de leur maille de provenance. On note $C_{l,j}^i$ la concentration du précurseur physique l , sur la maille i , provenant de j . Avec les hypothèses que l'on a faites, cela revient à multiplier par 7 le nombre de précurseurs.

Lors de l'initialisation du calcul cinétique, qui doit être faite sur la configuration de référence (c'est-à-dire que l'on a $X_j^i = \delta_{i,j} = 1$ si $i = j$, 0 sinon), on initialise classiquement les concentrations de précurseurs avant duplication, les C_l^i , puis on pose simplement $C_l^{i, ref} = C_l^i$.

Après chaque déplacement, avant le calcul d'évolution des concentrations de précurseurs, on les déplace en écrivant :

$$C_{l,j}^i = C_l^{j, ref} X_j^i.$$

On fait ensuite évoluer avec :

$$\frac{\partial C_{l,j}^i}{\partial t} = -\lambda_l C_{l,j}^i + \sum_g \left(\beta_l \nu \sigma_f^g \right)^{ref\ j} X_j^i \phi^g.$$

Il est indispensable lors de l'évolution de $C_{l,j}^i$ de bien prendre le $\beta_l \nu \sigma_f^g$ de la maille de provenance, ou l'on risquerait de faire apparaître des précurseurs à de mauvais endroits. La mise en œuvre de la méthode en est un peu compliquée puisque, pour se ramener au formalisme classique, cela revient à définir un $\beta_{l,j}^g$ effectif dépendant de l'espace et de l'énergie du neutron provoquant la fission. Heureusement, cette possibilité a été laissée dans l'architecture du code APOLLO3®.

Enfin, on met à jour les concentrations de précurseurs sur la configuration de référence :

$$C_l^{j\ ref} = \sum_i C_{l,j}^i.$$

La figure 7.12 illustre le déplacement des précurseurs obtenu avec cette méthode. À gauche on voit la concentration des précurseurs d'un groupe donné l au temps initial, sur une géométrie non déformée. Le même champ obtenu après un gerbage central du cœur est visible à droite (dans le formalisme précédent, on montre ici $\sum_j C_{l,j}^i$). Il n'y a pas eu de calcul cinétique entre les deux états, et les différences sont uniquement dues aux déplacements. On constate notamment qu'autour de l'assemblage central les concentrations ont diminué, ce qui est le résultat de l'écartement des assemblages de la première couronne.

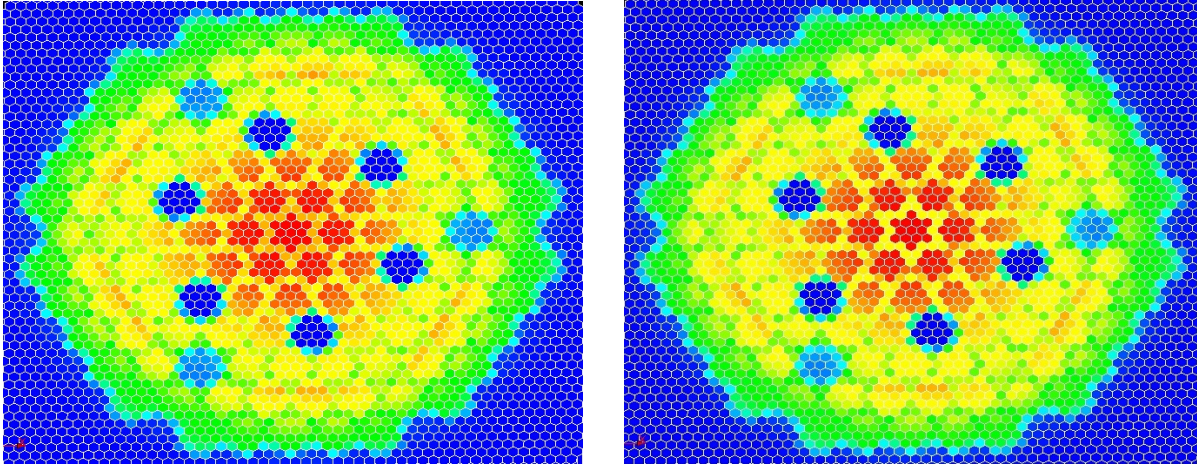


FIGURE 7.12 – Champ de concentrations d'un précurseur de neutrons retardés avant (à gauche) et après (à droite) gerbage central du cœur. Visualisation avec Salomé.

7.2.2 Evaluation de la méthode

Nous avons comparé deux transitoires identiques, l'un utilisant la méthode de déplacement des précurseurs que nous venons de présenter, l'autre non. Ces deux calculs sont faits avec APOLLO3® et utilisent la technique de déplacement de matière présentée section 7.1. Nous

utilisons ici encore une description de Phénix avec des concentrations de cœur neuf (voir paragraphe 6.2). Nous avons 33 groupes d'énergie, 6 groupes de précurseurs et des pixels de 3cm.

Le transitoire consiste à appliquer instantanément un gerbage central de forte amplitude (jeux inter-assemblages initialement comblés, voir 6.4) et à laisser ensuite évoluer la puissance du cœur librement. Pour information, l'effet en réactivité calculé pour cette déformation est de -183pcm en sodium et de -74pcm avec 99% d'eau.

La figure 7.13 donne l'évolution de la puissance globale, le temps étant représenté en échelle logarithmique. Chaque point sur les courbes correspond à un pas de temps. Notons que l'échelle de temps considérée (une fraction de seconde) ne permet de voir que l'évolution de puissance prompte. La puissance semble se stabiliser en fin de transitoire, mais la réactivité reste négative. Si on prolongeait le calcul, on verrait la puissance décroître jusqu'à 0, à la vitesse de disparition des précurseurs, c'est à dire sur quelques dizaines de secondes.

Quatre calculs ont été effectués, avec et sans déplacement des précurseurs, et avec 100% de sodium ou 99% d'eau et 1% de sodium, comme nous l'avons déjà fait dans la section 7.1.3. Le fait de rajouter de l'eau permet de thermaliser un peu le spectre neutronique. On constate que l'évolution de la puissance globale est très peu affectée par le déplacement des précurseurs, quel que soit le caloporteur. Le même constat est fait quand on compare les puissances locales (non illustré ici). On peut en déduire que si l'implémentation de la méthode est correcte, le déplacement des précurseurs peut en général être négligé pour les types de déformations que l'on étudie.

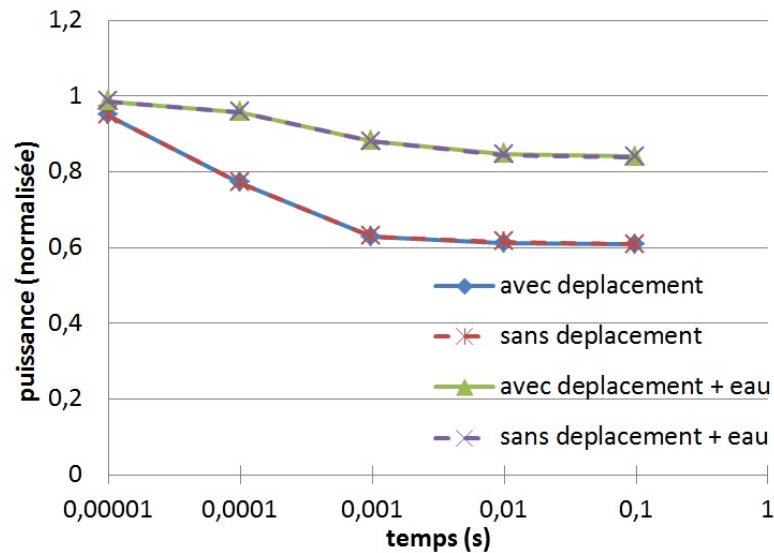


FIGURE 7.13 – Évaluation de l'impact du déplacement des précurseurs sur un transitoire de gerbage.

On peut comprendre ce résultat en voyant que les précurseurs créent une source de neutrons très minoritaire comparée à la fission prompte (de l'ordre de 0.003 neutrons retardés pour chaque neutron prompt). C'est le délai entre la création du précurseur et l'émission d'un neutron retardé (de l'ordre de la dizaine de secondes, à comparer avec une demi-vie des neutrons

promptes entre $10^{-3}s$ en REP et $10^{-6}s$ en RNR) qui rend leur prise en compte nécessaire, plus que leur localisation exacte. En outre, nous sommes toujours en spectre rapide, même lorsqu'on introduit de l'eau à la place du sodium, et l'effet d'un léger déplacement de cette source est gommé par le libre parcours moyen des neutrons, supérieur aux déplacements.

On tire les mêmes conclusions de l'étude de l'évolution de la puissance suite à une compaction du cœur. Pour simuler cette déformation, les assemblages ont été déplacés de façon arbitraire. On rapproche du centre du cœur la tête de chaque assemblage de $0.5\text{mm} \times \text{numéro de couronne}$. Les pieds des assemblages sont immobiles et les déplacements sont interpolés linéairement entre la tête et le pied. Cette déformation donne un effet en réactivité de $+105\text{pcm}$ en sodium, et de $+31\text{pcm}$ en eau. L'évolution de la puissance suite à une compaction instantanée est visible figure 7.14.

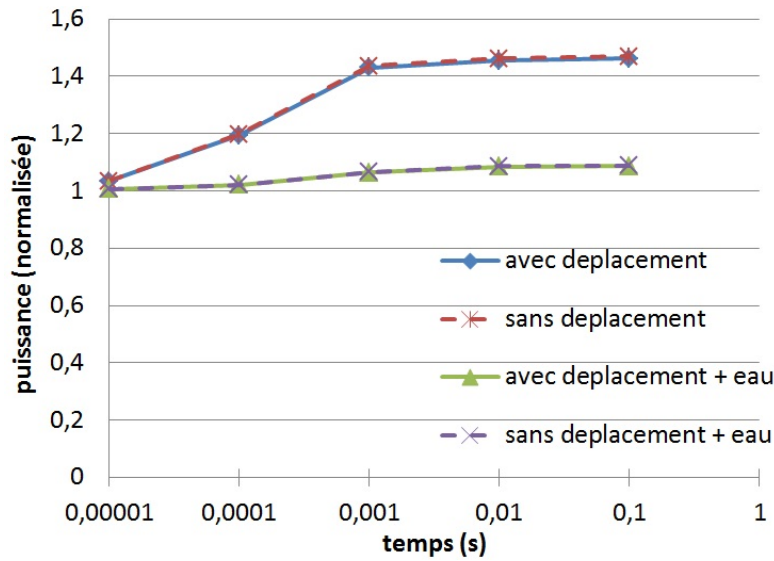


FIGURE 7.14 – Evaluation de l'impact du déplacement des précurseurs sur un transitoire de compaction.

Que cela soit pour le gerbage ou pour la compaction, l'effet du changement de caloporteur est quant à lui visible. La puissance évolue moins avec de l'eau, ce qui est cohérent avec le fait que les effets en réactivité des déformations sont plus faibles. En outre, la vitesse de variation de la puissance est également plus faible, ce qui est lié au ralentissement des neutrons par l'eau, et donc à l'augmentation de leur durée de vie.

7.3 Application aux essais de gerbage de Phénix

Dans cette section nous appliquons la méthode de pixellisation que nous venons de présenter aux essais de gerbage de Phénix. Le réacteur et ces essais ont déjà été présentés section 6.4.

Nous commençons par une tentative d'interprétation des essais de gerbage statique. Ce travail a constitué le cas d'application de la technique de pixellisation dans [83]. A la fin de cette section, nous traitons le gerbage dynamique, dans l'objectif principal de démontrer la faisabilité d'un tel calcul chainant mécanique et neutronique sur un cœur complet, en cinétique, avec les outils de référence.

7.3.1 Interprétation antérieure des essais statiques

Ces essais ont déjà été calculés en chaînant HARMONIE (basé sur CAST3M), pour la mécanique, et ERANOS pour la neutronique [94, 41]. HARMONIE modélise des assemblages idéaux, sans prendre en compte les déformations liées à leur irradiation. ERANOS travaille en RZ (symétrie de rotation) régulier, ce qui l'empêche de prendre en compte l'inclinaison des assemblages (mais l'angle d'inclinaison est faible, inférieur à 0.16° , et on a déjà vu que l'effet de l'inclinaison est négligeable section 7.1.3) et de modéliser l'essai de gerbage périphérique. Les résultats de ces calculs sont donnés figure 7.15, pour différentes hypothèses de jeux inter-assemblages. Des jeux théoriques à 180°C et à 400°C (soit environ 0.1 et 0.2mm respectivement), ainsi que des jeux nuls, ont été utilisés. La figure 6.4 illustre ce qu'on entend par jeux inter-assemblages. On constate, sur la figure 7.15, qu'en augmentant le jeu inter-assemblage on augmente la longueur de la phase initiale non linéaire, et qu'avec des jeux théoriques de 400°C , on reproduit approximativement les mesures.

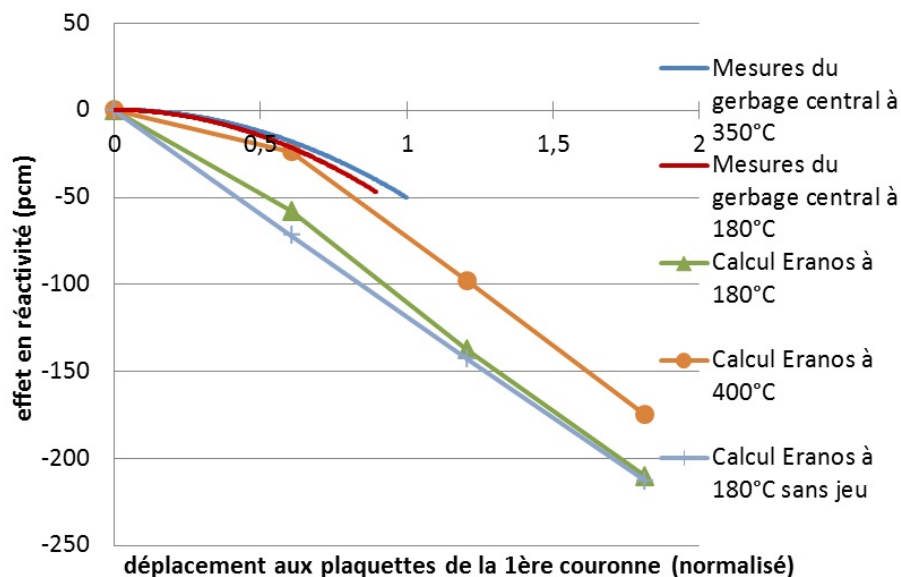


FIGURE 7.15 – Calculs précédents [94] des essais de gerbage statique avec ERANOS.

7.3.2 Notre tentative d'interprétation des essais de gerbage statiques

a. Considérations générales

Les calculs mécaniques sont réalisés avec CAST3M, à l'aide d'une méthode d'homogénéisation développée par Daniel Broc et présentée dans [19, 20]. Chaque assemblage est représenté par un élément poutre encastré à la base. Les chocs sont pris en compte par une rigidité de contact. On ne prend pas en compte les déformations initiales des assemblages dues à l'irradiation.

Nous utilisons ici les mêmes compositions isotopiques, évoluées, que lors de l'étude précédente, comme expliqué au paragraphe 6.2.

Des calculs préliminaires montrent que si les déformations mécaniques considérées sont les mêmes, les résultats dépendent peu de la température à laquelle est réalisé l'essai. Pour le gerbage central nous nous sommes donc concentrés sur l'essai à 180 °C. Nous avons également évalué l'impact d'un blocage des protections neutroniques (couronne 9 et plus). L'effet trouvé est faible. En particulier, comme les couronnes bloquées sont loin du centre, la pente à l'origine des essais centraux n'est pas affectée.

b. Gerbage statique central

Nos résultats sur l'essai de gerbage central statique, à 180 °C, sont donnés figure 7.16 en fonction de différentes hypothèses sur la taille du jeu inter-assemblage. Les assemblages eux-mêmes ne sont pas déformés. Nous pouvons voir que si nous n'utilisons pas de jeu inter-assemblage, nous retrouvons des résultats proches de ceux de l'étude précédente, ce qui est normal puisque nous utilisons les mêmes hypothèses et compositions. En particulier, on trouve dans les deux cas une loi linéaire. Quand la taille des jeux inter-assemblages est non nulle, on voit apparaître deux phases. La première, qui est d'autant plus longue que les jeux sont grands, correspond au comblement des jeux inter-assemblages. Pendant cette phase, l'effet en réactivité de la déformation est plus faible que dans le cas sans jeu. La deuxième phase, qui arrive une fois les jeux fermés, est linéaire et a une pente semblable à celle trouvée sans jeu. Ce comportement est cohérent avec ce qui avait déjà été observé lors de l'étude précédente (figure 7.15). On trouve une bonne adéquation avec les mesures pour des jeux de 0.3mm (alors que les jeux naturels sont d'environ 0.1mm à 180 °C, et de 0.2mm à 350 °C).

Un calcul a été fait avec des jeux aléatoires tirés entre 0 et 0.6mm de façon uniforme. Les résultats sont très proches de ceux obtenus avec les jeux constants de 0.3mm, c'est à dire la moyenne des jeux aléatoires.

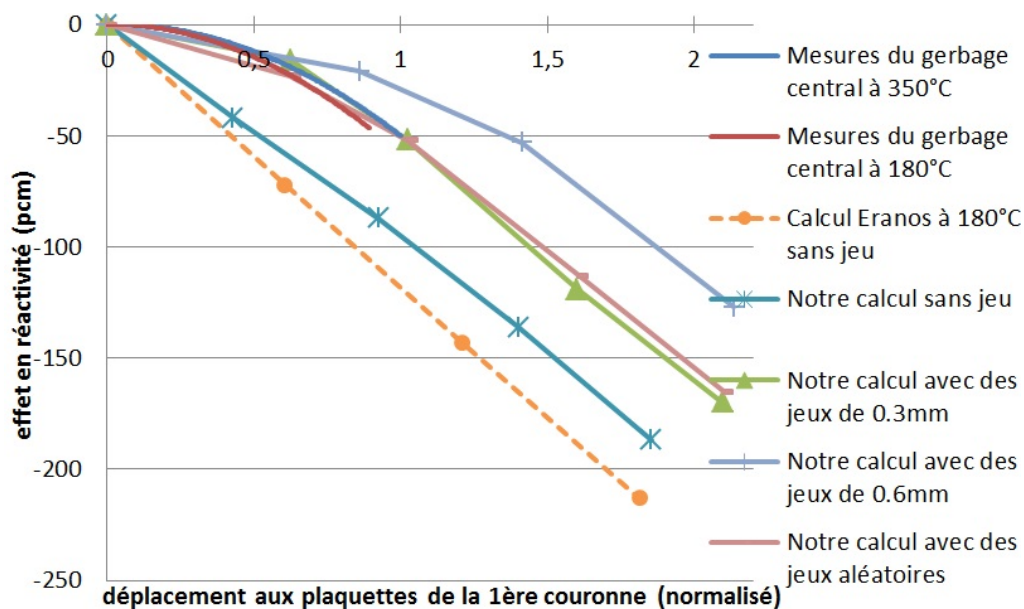


FIGURE 7.16 – Nos calculs de l'essai de gerbage central à 180 °C.

c. Gerbage statique périphérique

Les résultats de nos calculs de l'essai de gerbage statique périphérique sont donnés figure 7.17. Comme précédemment, on trouve une loi linéaire décroissante dans le cas sans jeu inter-assemblage. Cependant, quand on introduit des jeux, la phase de transition est plus longue que lors du gerbage central (il est plus long de combler tous les jeux entre deux bords du cœur qu'entre le centre et les bords). Remarquons que l'on trouve une réactivité légèrement positive au début du gerbage pour des jeux importants (on commence par rapprocher des assemblages du centre du cœur), ce qui rappelle l'effet en réactivité très légèrement positif (2pcm) mesuré au début des essais.

La meilleure comparaison calcul/mesure est obtenue pour des jeux inférieurs à ceux trouvés pour le gerbage central (0.1mm au lieu de 0.3mm). On pourrait penser que cela est dû à une déformation d'irradiation différente des assemblages en périphérie du cœur, mais nous allons voir que ce n'est pas le cas. En outre, on trouve ici encore des résultats très proches avec des jeux aléatoires et avec des jeux homogènes de même moyenne (la courbe n'est pas donnée ici).

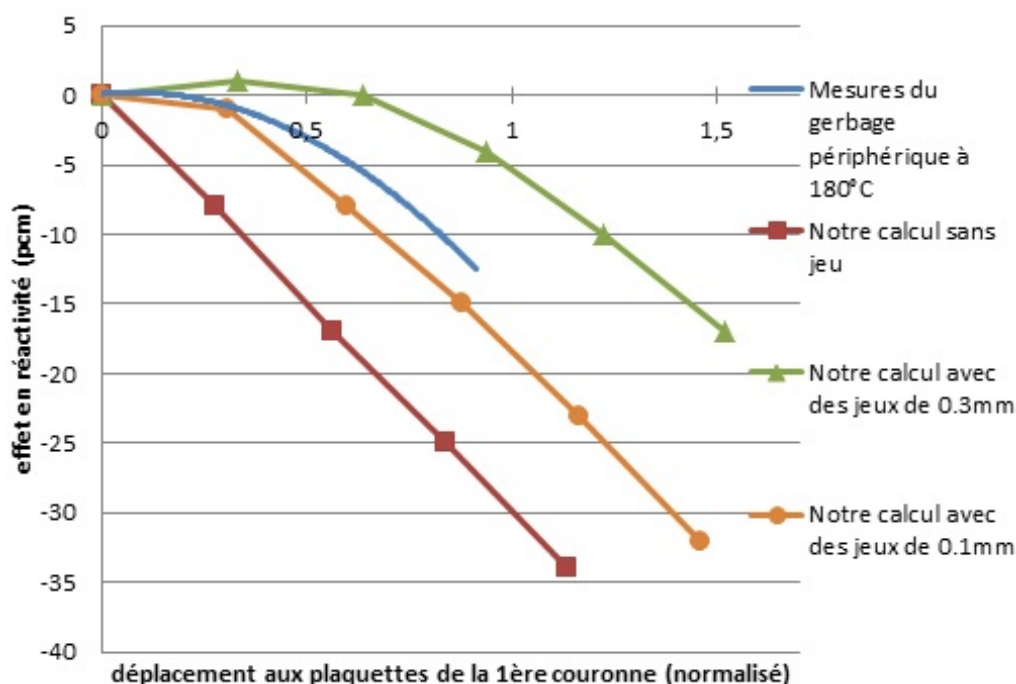


FIGURE 7.17 – Nos calculs de l'essai de gerbage périphérique à 180 ° C.

d. Interprétation et tentative d'unification des deux essais statiques

Nos résultats confirment ce que l'étude précédente avait déjà montré, à savoir que l'effet en réactivité du gerbage dépend fortement de la compacité initiale du cœur. Les essais semblent montrer qu'elle est la même à 180 ° C et à 350 ° C, les effets en réactivité mesurés aux deux températures étant proches. Nous pensons donc que la compacité du cœur est due aux déformations des assemblages, qui se repoussent les uns les autres, plutôt qu'aux dilatations thermiques différentielles des boîtiers hexagonaux et du sommier. Ainsi, si les assemblages sont

déjà en contact à 350 ° C, on comprend que l'état du cœur reste le même à 180 ° C, et qu'on retrouve donc les mêmes effets en réactivité à déformation donnée. De plus, la compression qui est tout de même exercée par le sommier pourrait expliquer que les efforts mesurés, eux, dépendent de la température (figure 6.5).

Nous avons vu que nous avons besoin de jeux de 0.3mm pour reproduire l'essai de gerbage central, mais de jeux de seulement 0.1mm pour le gerbage périphérique. On peut penser que ce résultat indique un réseau d'assemblage moins dense au centre qu'en périphérie. Pour le vérifier nous avons fait un calcul avec des jeux dits « variables », maximums au centre (0.6mm), minimums en cinquième couronne (0.0mm) et linéairement interpolés entre les deux. On peut voir sur la figure 7.18 que, bien qu'on obtienne de bons résultats pour le gerbage central, on est assez éloigné des mesures pour le gerbage périphérique. Quand on compare ces résultats aux précédents, on remarque que les jeux variables donnent des effets en réactivité proches de ceux des jeux de 0.3mm. Ce résultat n'est pas sans rappeler les jeux aléatoires qui donnaient des résultats similaires aux jeux constants de même moyenne, la principale différence étant que la moyenne ne doit pas se faire ici sur tout le volume du cœur, mais sur une droite du plan horizontal passant par le centre. Cela fait sens si on considère que la déformation se transmet de proche en proche, par contact sur six axes privilégiés (c'est visible sur le champ de dilution, figure 7.4).

On peut tirer deux conclusions de cette étude. Premièrement, un gerbage est une déformation globale et l'effet en réactivité induit ne dépend pas seulement de l'état local du cœur. Deuxièmement, il semble que nos calculs mécaniques reproduisent mal le comportement réel du cœur. Il serait nécessaire d'améliorer la modélisation mécanique des essais.

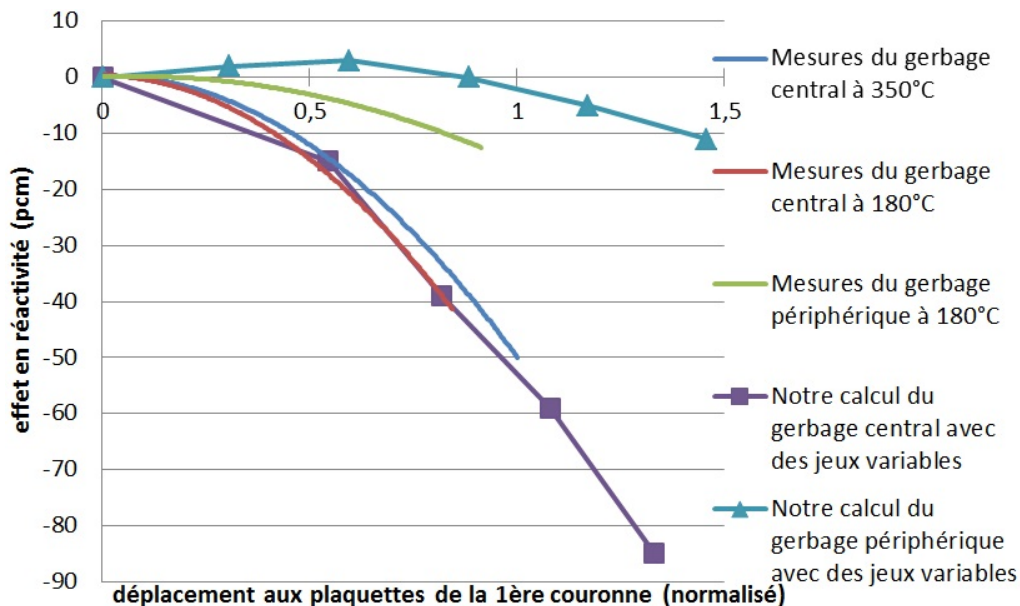


FIGURE 7.18 – Nos résultats pour les deux essais avec des jeux variables.

7.3.3 Application de notre méthodologie à un transitoire inspiré des essais de gerbage dynamique

a. Calculs mécaniques

La méthode de pixellisation que nous avons développée dans APOLLO3® permet de mener aussi bien des calculs cinétiques que des calculs critiques. Il est donc possible et intéressant de chercher à prédire le comportement neutronique d'un cœur lorsqu'il est soumis à des déformations rapides, comme lors des essais de gerbage dynamique.

Comme nous l'avons évoqué en section 6.4, il n'y a pas eu de mesures neutroniques pendant les essais dynamiques. La confrontation à l'expérience de nos calculs neutroniques n'est donc pas possible sur cet essai. En outre, même si les informations sur la déformation mécanique du cœur sont plus nombreuses que pour l'essai statique, nous n'avons pas cherché à reproduire fidèlement le comportement mécanique. Cela aurait demandé un long travail de comparaison et d'ajustement du modèle et de ses paramètres qui est hors de propos ici. Nous considérons donc un transitoire proche d'un gerbage dynamique, calculé avec un jeu de données CAST3M développé spécifiquement pour ce type de calcul [20]. Les hypothèses du calcul sont les mêmes que celles pour le gerbage statique (voir paragraphe a. de la section 7.3.2).

Le transitoire consiste à écarter les assemblages de la première couronne du cœur, comme lors d'un gerbage stationnaire, de 1cm, en une seconde. Ensuite, pendant une demi-seconde, on ne fait rien mais on maintient l'écartement. Enfin, on "lâche" brutalement (en 0.01s) la première couronne. Les assemblages vont revenir à leur position initiale en oscillant un peu et en s'entrechoquant.

La figure 7.19 donne un aperçu des déformations du cœur pendant ce calcul. On a tracé ici le déplacement des assemblages d'une diagonale du cœur, au niveau des plaquettes. On rappelle que les diagonales constituent les axes de déformation privilégiés lors de gerbages, les autres assemblages se déplacent donc sensiblement moins. Les courbes sont initialement écartées du jeu inter-assemblages considérés lors du calcul, c'est à dire 0.4mm. Ainsi, il y a contact entre les assemblages lorsque les courbes se touchent. On remarque que les courbes s'interpénètrent, ce qui correspond aux déformations des boîtiers hexagonaux. On constate que le retour à l'équilibre se fait bien de façon oscillante et on observe des chocs à la compaction initiale puis pendant l'expansion qui suit.

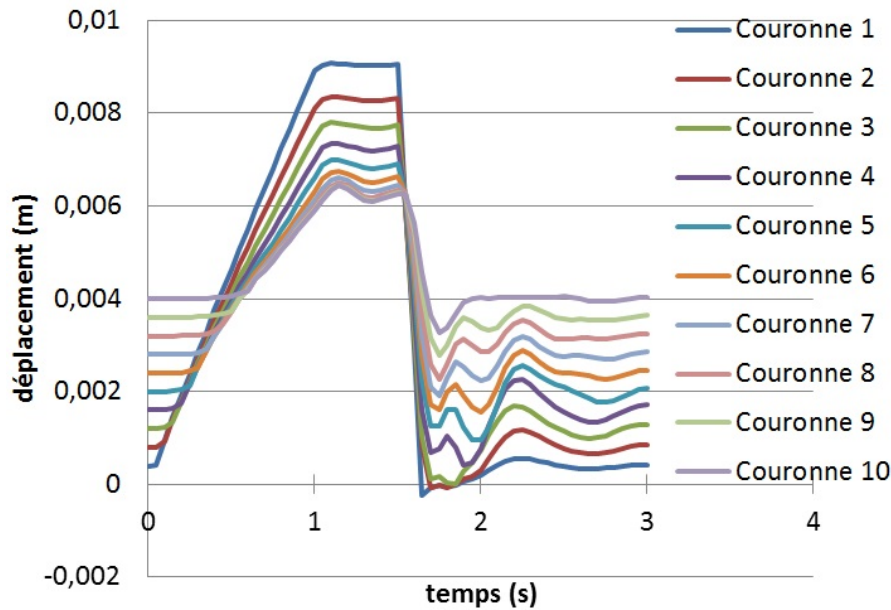


FIGURE 7.19 – Déplacement, au niveau des plaquettes, des assemblages sur une diagonale du cœur de Phénix, lors d'un transitoire semblable à un gerbage dynamique.

b. Calculs neutroniques

Ce transitoire mécanique a servi de donnée d'entrée à un calcul neutronique cinétique. Il ne s'agit pas ici d'un couplage, puisque la mécanique a été calculée indépendamment de la neutronique, mais d'un chaînage entre les disciplines.

On utilise les données nucléaires évoluées habituelles pour nos calculs de gerbage (voir section 6.2). Le pas de temps est fixé à 0.05s. Les évolutions obtenues pour la puissance et la réactivité du cœur sont tracées figure 7.20 et 7.21. Comme précédemment (section 7.2.2), le même résultat est obtenu en déplaçant, ou non, les précurseurs de neutrons retardés pendant le calcul. Pendant la phase d'expansion lente du réseau, lors de la première seconde, la puissance décroît régulièrement en suivant la décroissance de la réactivité. Elle continue de décroître, mais plus lentement, pendant la demi-seconde de maintien du cœur en situation ouverte. La vitesse de décroissance (jusqu'à 0) de la puissance est pilotée, dans cette phase, par la vitesse de disparition des précurseurs, la réactivité restant constante. Quand le dispositif écarteur s'efface, la puissance oscille en opposition de phase avec la réactivité et donc le déplacement des assemblages : elle est maximale lorsque le cœur est compacté, et minimale lorsqu'il se réouvre. A la fin du transitoire, la puissance se stabilise à une valeur non nulle inférieure à la puissance initiale, à cause de la diminution des concentrations de précurseurs qui a eu lieu pendant ce transitoire où la puissance était globalement inférieure à la puissance initiale. La réactivité elle, retourne vers 0.

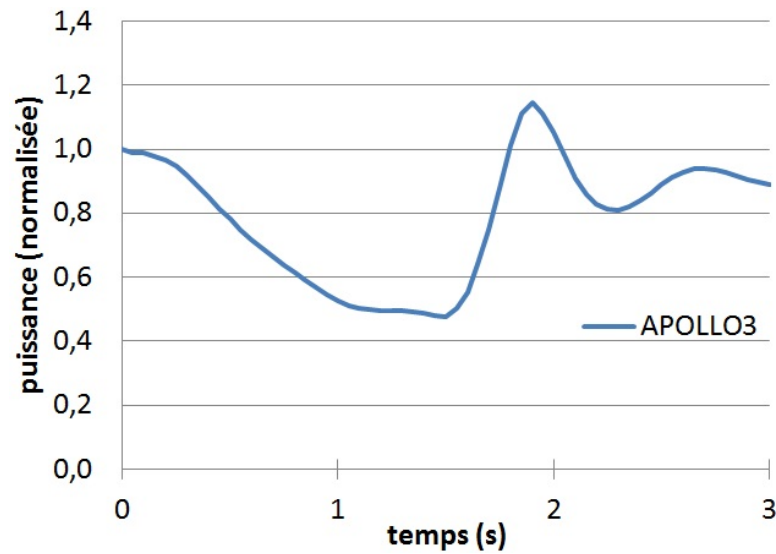


FIGURE 7.20 – Evolution de la puissance trouvée par APOLLO3® lors d'un transitoire semblable à un gerbage dynamique.

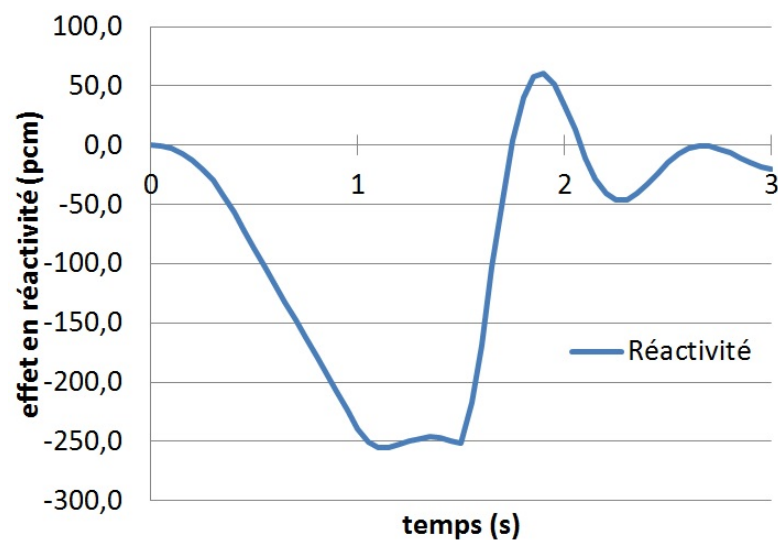


FIGURE 7.21 – Evolution de la réactivité trouvée par APOLLO3® lors d'un transitoire semblable à un gerbage dynamique.

Même si on ne peut se comparer à des résultats expérimentaux, les résultats de ce calcul sont cohérents avec notre compréhension des phénomènes. On démontre ainsi la faisabilité d'un calcul cinétique qui chaîne mécanique et neutronique sur un cœur complet, avec les outils de référence.

Déformation de géométrie à maillage mobile avec CAST3M

Au chapitre 7 nous avons présenté une méthode de pixellisation qui permet de déplacer la matière sans modifier le maillage du solveur neutronique. Elle nécessite néanmoins un grand nombre de mailles et une approximation des déplacements à l'échelle des pixels.

Dans ce chapitre nous présentons une autre méthode qui permet de déformer géométrie et maillage en même temps. On évite ainsi les inconvénients de la méthode de pixellisation, et pouvons envisager la résolution des problèmes neutronique et thermomécanique dans le même environnement, ce qui facilite le couplage. Nous risquons en revanche de ne pouvoir distinguer les effets dus aux déplacements physiques de matière des effets numériques liés au changement de maillage. Des comparaisons entre les résultats des deux méthodes sont donc nécessaires pour juger de l'importance de leurs approximations respectives.

Nous utilisons dans ce chapitre le code CAST3M, pour sa flexibilité, sa capacité à déplacer facilement ses nœuds de calcul, et la proximité et disponibilité de ses développeurs au SEMT. Il s'agit néanmoins d'un code de mécanique qui n'est pas prévu pour résoudre des problèmes neutroniques. L'essentiel du travail a donc consisté en le développement d'un solveur neutronique dans CAST3M. Nous nous sommes basés pour cela sur la capacité de CAST3M à résoudre numériquement les équations elliptiques, et en particulier les problèmes de diffusion à source (s'utilise en thermique par exemple). Les schémas numériques bâtis sur cette base sont similaires à ceux de CRONOS [65] ou du solveur MINOS d'APOLLO3®. Les conseils de leurs développeurs au SERMA ont été indispensables.

Le chapitre est divisé en quatre sections. La section 8.1 présente très rapidement la méthode des éléments finis, prérequis au reste du chapitre. Les sections 8.2 et 8.3 traitent ensuite respectivement de la résolution de problèmes critiques et cinétiques dans CAST3M. Enfin la section 8.4 applique ces outils aux essais de gerbage de Phénix.

L'essentiel des travaux présentés dans ce chapitre ont été publiés dans [85].

8.1 Quelques rappels sur la méthode des éléments finis

Nous utilisons des algorithmes de résolution d'équations différentielles de CAST3M basés sur les éléments finis. Avant d'aller plus loin, nous allons en rappeler le principe, sans chercher à en justifier la validité. [1] fournit un exposé plus complet sur le sujet, dont on a extrait les éléments présentés ici.

8.1.1 Formulation variationnelle

La méthode des éléments finis se base sur une reformulation du problème à résoudre, que l'on appelle formulation variationnelle.

Dans cette formulation, le problème s'exprime sous la forme :

$$\text{Trouver } u \in V \text{ tel que } a(u, v) = L(v) \quad \forall v \in V$$

avec V un espace de fonctions qui n'est pas toujours celui sur lequel on cherche initialement la solution, a une forme bilinéaire sur V et L une forme linéaire sur V .

Donnons un exemple concret. Supposons que nous ayons à résoudre, sur un domaine ouvert Ω de \mathbb{R}^N , le laplacien avec une condition aux limites de Dirichlet :

$$\begin{cases} -\Delta u = f & \text{dans } \Omega \\ u = 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (8.1)$$

$\partial\Omega$ est le bord, ou la frontière, de Ω , f est ce qu'on appelle un second membre et u est l'inconnue.

Pour trouver la formulation variationnelle de (8.1), on multiplie l'équation par une "fonction test" v et on intègre sur Ω :

$$\int_{\Omega} -\Delta u v d\Omega = \int_{\Omega} f v d\Omega$$

On transforme le terme de gauche en utilisant la relation suivante, déduite de la formule d'intégration par parties :

$$\int_{\Omega} \Delta u v d\Omega = - \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v d\Omega + \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial n} v ds$$

valable pour Ω un ouvert régulier de classe C^1 , $u \in C^2(\bar{\Omega})$ et $v \in C^1(\bar{\Omega})$, toutes deux à support borné dans $\bar{\Omega}$.

L'intégrale sur le bord est éliminée en choisissant un espace de fonction V qui s'annule sur le bord, ce qui permet en plus d'imposer la condition aux limites. On peut prendre par exemple :

$$V = \{ \phi \in C^1(\bar{\Omega}) \text{ tel que } \phi = 0 \text{ sur } \partial\Omega \}.$$

On a ainsi reformulé le problème sous la forme :

$$\text{Trouver } u \in V \text{ tel que } \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v d\Omega = \int_{\Omega} f v d\Omega \quad \forall v \in V.$$

$$\text{On a bien la forme attendue avec } a(u, v) = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v d\Omega \text{ et } L(v) = \int_{\Omega} f v d\Omega.$$

On peut noter que l'on cherche maintenant $u \in C^1(\bar{\Omega})$, alors que la formulation initiale du problème (8.1) imposait au minimum à la solution d'être deux fois dérivable. On peut noter également que la condition aux limites est portée par le choix de V . Ce n'est pas toujours le cas, et l'intégrale sur le bord apparaissant dans l'intégration par partie peut être utilisée à la place (conditions aux limites de Neumann par exemple, portant sur $\frac{\partial u}{\partial n}$).

Nous admettons ici l'équivalence entre la formulation classique et la formule variationnelle. Une démonstration complète peut être trouvée dans [1]. La démonstration impose notamment un choix de V un peu différent de celui qu'on a fait ici, parce qu'on a besoin de travailler sur un espace de Hilbert. Dans notre cas, on pourrait prendre l'espace de Sobolev $H_0^1(\Omega)$, défini comme l'ensemble des fonction $L^2(\Omega)$ qui s'annulent sur $\partial\Omega$ et dont les dérivées partielles faibles sont aussi $L^2(\Omega)$.

8.1.2 Éléments finis

La méthode des éléments finis est directement issue de l'approche variationnelle que nous venons d'exposer. Elle consiste à remplacer l'espace V sur lequel est posée la formulation variationnelle par un sous-espace V_h de dimension finie. V_h est choisi de manière à ce que la solution u_h de la formulation variationnelle, dans V_h , soit "proche" de la solution exacte dans V .

La résolution du problème peut alors se ramener à la simple résolution d'un système linéaire. Pour cela, introduisons une base $(\xi_j)_{1 \leq j \leq N_h}$ de V_h . On note $u_h = \sum_{j=1}^{N_h} u_j \xi_j$ la solution du problème variationnel sur V_h . On pose U_h le vecteur des $(u_j)_{1 \leq j \leq N_h}$. On admet que la résolution du problème variationnel sur V_h est équivalent à :

$$\text{Trouver } U_h \in \mathbb{R}^{N_h} \text{ tel que } a \left(\sum_{j=1}^{N_h} u_j \xi_j, \xi_i \right) = L(\xi_i) \quad \forall i \in \llbracket 1, N_h \rrbracket,$$

ce qui peut se réécrire sous la forme du système linéaire suivante :

$$\mathcal{K}_h U_h = b_h,$$

avec, pour $i, j \in \llbracket 1, N_h \rrbracket$:

$$(\mathcal{K}_h)_{ij} = a(\xi_j, \xi_i), \quad (b_h)_i = L(\xi_i).$$

On voit que cela revient à "tester" la formulation variationnelle sur chacun des éléments de la base de V_h . La matrice \mathcal{K}_h est souvent appelée matrice de rigidité.

Les méthodes d'éléments finis introduisent un maillage de l'espace Ω , c'est à dire un pavage par des volumes élémentaires simples. On choisit alors une base de V_h constituée de fonctions

dont le support est localisé sur un petit nombre de mailles. Cela permet de rendre la matrice \mathcal{K}_h creuse, c'est à dire de rendre la plupart de ses éléments nuls, ce qui simplifie la résolution du système linéaire.

Donnons un exemple simple. On considère le problème déjà vu (8.1) sur $\Omega =]0, 1[$. On peut le réécrire ainsi :

$$\begin{cases} -u'' = f & \text{dans }]0, 1[\\ u(0) = u(1) = 0. \end{cases} \quad (8.2)$$

On introduit un maillage uniforme du domaine $(x_j)_{0 \leq j \leq n+1} : x_j = jh$, avec $h = \frac{1}{n+1}$. On a notamment $x_0 = 0$ et $x_{n+1} = 1$. Les x_j sont appelés sommets ou nœuds du maillage.

On appelle \mathbb{P}_1 l'ensemble des polynômes de degré 1. On va introduire la méthode des éléments finis dits \mathbb{P}_1 sur le maillage que l'on a défini, c'est à dire que l'on cherche une solution sur l'espace V_{0h} ainsi défini :

$$V_{0h} = \{v \in \mathcal{C}([0, 1]) \text{ tel que } v|_{[x_j, x_{j+1}]} \in \mathbb{P}_1 \ \forall j \in \llbracket 0, n \rrbracket \text{ et tel que } v(0) = v(1) = 0\}.$$

Pour construire une base simple de V_{0h} , on introduit la fonction ξ ainsi définie :

$$\xi(x) = \begin{cases} 1 - |x| & \text{si } |x| \leq 1, \\ 0 & \text{si } |x| > 1. \end{cases}$$

On peut alors introduire les fonctions ξ_j définies pour $j \in \llbracket 0, n+1 \rrbracket$ par :

$$\xi_j(x) = \xi\left(\frac{x - x_j}{h}\right).$$

Une illustration du maillage et des fonctions de base ξ_j est donnée figure 8.1.

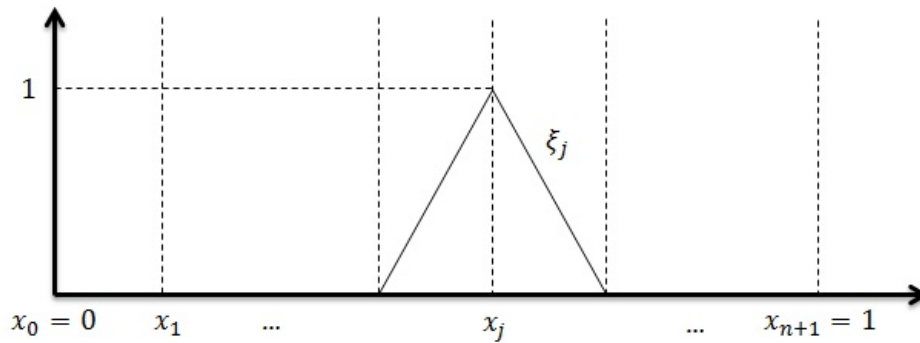


FIGURE 8.1 – Maillage de Ω et fonction de base en éléments finis \mathbb{P}_1

On remarque que, dans ce cas précis, pour un élément v_h de V_{0h} , les coordonnées dans la base des ξ_j sont en même temps les valeurs de v_h en x_j . On peut donc écrire $v_h(x) = \sum_{j=1}^n v_h(x_j) \xi_j(x) \ \forall x \in [0, 1]$.

Quand on applique la méthode des éléments finis à la formulation variationnelle, déjà exprimée, de (8.1), on obtient le système linéaire suivant :

$$\mathcal{K}_h U_h = b_h,$$

avec $U_h = (u_j)_{1 \leq j \leq n}$ le vecteur des coordonnées de la solution approchée u_h sur V_{0h} , $b_h = \left(\int_0^1 f(x) \xi_i(x) dx \right)_{1 \leq i \leq n}$ et $\mathcal{K}_h = \left(\int_0^1 \xi'_j(x) \xi'_i(x) dx \right)_{1 \leq i, j \leq n}$.

Les dérivées des fonctions de base ξ_j sont constantes sur les intervalles entre les nœuds du maillage et valent 0, $\frac{1}{h}$ ou $-\frac{1}{h}$. Il est donc aisé de calculer la matrice \mathcal{K}_h :

$$\mathcal{K}_h = \frac{1}{h} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & 0 \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ 0 & & & -1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Il ne reste plus qu'à calculer le second membre, b_h , pour définir le système linéaire à résoudre. Sa détermination dépend de f et donc du problème considéré. Des formules dites de quadratures sont souvent utilisées pour approcher le calcul de l'intégral.

8.1.3 Conditions aux limites

Dans l'exemple donné, les conditions aux limites sont prises en compte en réduisant la matrice "naturelle", de dimension $n+2$, soit le nombre de fonctions élémentaires, à une matrice de dimension n .

Ce n'est pas la seule façon de procéder et les codes industriels, comme CAST3M, adoptent généralement une approche plus constructive. Plutôt que de diminuer la taille du problème, on l'augmente par l'ajout de multiplicateurs de Lagrange (voir le chapitre dédié de la documentation du code : [27]). Ce type de techniques est bien expliqué dans [87]. CAST3M modifie seul les matrices et les seconds membres pour prendre en compte les conditions aux limites que l'on impose. Nous ne nous étendrons donc pas sur le sujet, et les matrices que nous présenterons par la suite incorporerons implicitement la prise en compte des conditions aux limites.

8.2 Implémentation d'un solveur de diffusion neutronique stationnaire dans CAST3M

8.2.1 Méthode de résolution

Ecrivons l'équation de diffusion neutronique stationnaire (voir section 1.4 pour une introduction à la neutronique) que l'on va résoudre avec des conditions aux limites de Dirichlet (flux neutronique nul au bord). On écrit l'équation à la position \vec{r} du domaine Ω , pour le groupe d'énergie g . On note N_g le nombre de groupes d'énergie. $\phi^g(\vec{r})$ est le flux neutronique que l'on cherche. ∇ est l'opérateur nabla, $D^g(\vec{r})$ le coefficient de diffusion, $\sigma_{disp}^g(\vec{r})$ la section efficace macroscopique de disparition, $\sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r})$ la section efficace macroscopique de transfert

du groupe g' vers le groupe g , K_{eff} le coefficient multiplicateur, $\chi^g(\vec{r})$ la proportion de neutrons issus de fission qui naissent dans le groupe g (on a $\chi^g(\vec{r}) \in [0, 1]$ et $\sum_g \chi^g(\vec{r}) = 1 \forall \vec{r}$) et $\nu\sigma_f^{g'}(\vec{r})$ la section efficace macroscopique de production de neutrons de fission. Tous ces éléments sont positifs. On a l'équation suivante :

$$-\nabla(D^g(\vec{r})\nabla\phi^g(\vec{r})) + \sigma_{disp}^g(\vec{r})\phi^g(\vec{r}) = \sum_{g' \neq g} \sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r})\phi^{g'}(\vec{r}) + \frac{1}{K_{eff}} \chi^g(\vec{r}) \sum_{g'} \nu\sigma_f^{g'}(\vec{r})\phi^{g'}(\vec{r}). \quad (8.3)$$

On note ξ_j , pour $j \in \llbracket 1, N_h \rrbracket$, les fonctions de base des éléments finis choisis. On note également $\Phi^g = (\phi_j^g)_{1 \leq j \leq N_h}$ le vecteur des coordonnées de ϕ^g sur les ξ_j . Φ est le vecteur concaténant les Φ^g . On peut alors définir les matrices D , T et F qui vont intervenir dans la résolution. Dans la définition des indices des matrices, i et j varieront entre 1 et N_h et g et g' entre 1 et N_g . On a alors :

- $(D)_{k=i+N_h(g-1), l=j+N_h(g-1)} = \int_{\Omega} D^g(\vec{r}) \nabla \xi_i(\vec{r}) \nabla \xi_j(\vec{r}) d\Omega + \int_{\Omega} \sigma_{disp}^g(\vec{r}) \xi_i(\vec{r}) \xi_j(\vec{r}) d\Omega$. On peut remarquer que D est diagonale par bloc sur les groupes d'énergie. Chaque bloc, que l'on note D^g , est obtenu en fixant g dans la définition des indices.
- $(T)_{k=i+N_h(g-1), l=j+N_h(g'-1)} = \int_{\Omega} \sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}) \xi_i(\vec{r}) \xi_j(\vec{r}) d\Omega$ (ici on impose un coefficient nul lorsque $g = g'$). On note $T^{g' \rightarrow g}$ le bloc obtenu en fixant g et g' dans la définition des indices de T .
- $(F)_{k=i+N_h(g-1), l=j+N_h(g'-1)} = \int_{\Omega} \chi^g(\vec{r}) \nu\sigma_f^{g'}(\vec{r}) \xi_i(\vec{r}) \xi_j(\vec{r}) d\Omega$. On note $F^{g' \rightarrow g}$ le bloc obtenu en fixant g et g' dans la définition des indices de F .

L'équation se réécrit alors simplement :

$$D\Phi = T\Phi + \frac{1}{K_{eff}} F\Phi. \quad (8.4)$$

On résout cette équation par la méthode bien connue de la puissance itérée [89] :

1. On se donne $\Phi^{(0)}$, un flux initial. Par exemple $\phi_j^{g(0)} = 1 \forall j, g$. Dans le cas d'un calcul perturbatif, on utilise le flux nominal pour initialiser le calcul perturbé.
2. On itère jusqu'à convergence $\left(\frac{\|\Phi^{(n)} - \Phi^{(n-1)}\|_2}{\|\Phi^{(n)}\|_2} < \varepsilon_1 \text{ et } |K_{eff}^{(n-1)} - K_{eff}^{(n-2)}| < \varepsilon_2 \right)$:
 - (a) Calcul de $K_{eff}^{(n-1)}$ par quotient de produits scalaires des termes de fission des deux dernières itérations. Cela oblige à poser $K_{eff}^{(0)} = K_{eff}^{(1)} = 1$. $\langle f, g \rangle$ désigne le produit scalaire classique sur l'espace des fonctions, qui s'écrit ainsi en utilisant la base des ξ_j : $\langle f, g \rangle = \sum_{i,j} f_i g_j \int_{\Omega} \xi_i(\vec{r}) \xi_j(\vec{r}) d\Omega$. On calcule $K_{eff}^{(n-1)}$ ainsi :

$$K_{eff}^{(n-1)} = \frac{\langle F\Phi^{(n-1)}, F\Phi^{(n-1)} \rangle}{\langle F\Phi^{(n-1)}, \frac{1}{K_{eff}^{(n-2)}} F\Phi^{(n-2)} \rangle} \quad (8.5)$$

(b) Parcours des groupes g croissants :

i. Calcul de la source $S^{g(n-1)}$:

$$\begin{aligned} \left(S^{g(n-1)} \right) &= \sum_{g' < g} T^{g' \rightarrow g} \Phi^{g'(n)} + \sum_{g' > g} T^{g' \rightarrow g} \Phi^{g'(n-1)} \\ &+ \frac{1}{K_{eff}^{(n-1)}} \left(\sum_{g' < g} F^{g' \rightarrow g} \Phi^{g'(n)} + \sum_{g' \geq g} F^{g' \rightarrow g} \Phi^{g'(n-1)} \right). \end{aligned}$$

ii. Résolution du problème de diffusion $D^g \Phi^{g(n)} = S^{g(n-1)}$.

On peut remarquer que cette méthode revient à faire des itérations de Gauss-Seidel pour calculer le couplage des flux des différents groupes d'énergie.

On peut justifier "à la main" la formule de mise à jour du K_{eff} (8.5) en rappelant que le K_{eff} est physiquement le nombre de neutrons de fissions de la génération n qui engendrent des fissions à la génération $n + 1$. Il est donc introduit dans l'équation (8.3) en quelque sorte pour normaliser le taux de fission. La formule (8.5) revient à imposer que la projection sur un vecteur donné, $F\Phi^{(n-1)}$, des taux de production normalisés de neutrons de fission sur deux itérations successives (assimilées à des générations de neutrons) soient les mêmes, ce qui est une condition nécessaire de convergence du solveur.

La flexibilité de CAST3M fait que ce solveur est indépendant du maillage ou du type d'éléments finis utilisés. Dans les cas d'application de ce chapitre, on utilise, à deux dimensions, un mélange de mailles triangulaires et quadrilatérales. Les fonctions de base des éléments finis sont des polynômes d'ordre 1 sur les triangles (appelées P1), et des polynômes d'ordre 1 par rapport à chaque variable sur les quadrilatères (appelées Q1). A trois dimensions, les mailles sont des prismes droits à base triangulaires ou quadrilatérales. Les fonctions de base sont celles des triangles ou des quadrilatères formant les bases, multipliées par des polynômes d'ordre 1 en z .

8.2.2 Convergence du solveur

Nous allons montrer ici que si notre solveur converge, il converge vers la solution physique du problème.

Commençons par considérer l'équation matricielle (8.4). La matrice de transfert contient en général (et dans nos applications) des termes dits de "up-scattering", de transfert vers un groupe d'énergie supérieur. Posons $T = L + U$ avec L qui regroupe les termes de transfert vers les groupes inférieurs, et U qui regroupe les termes d'up-scattering. L est triangulaire inférieure stricte et U triangulaire supérieure stricte. On peut raisonnablement supposer D inversible. L étant strictement inférieure, $D - L$ est toujours inversible. On peut donc réécrire (8.4) sous la forme :

$$(D - L)^{-1}(F + K_{eff}U)\Phi = K_{eff}\Phi \quad (8.6)$$

Ainsi le K_{eff} peut être vu comme la valeur propre d'un problème non linéaire (dépendant du K_{eff}). Sous des hypothèses raisonnables, dans le chapitre 3 de [89] on trouve une démonstration du théorème suivant :

Le problème (8.6) a une valeur propre positive simple strictement supérieure en module aux autres valeurs propres. Le vecteur propre associé est positif et est le seul vecteur propre non-négatif de (8.6).

L'algorithme de résolution utilisé n'est pas la méthode de la puissance itérée habituelle pour la recherche d'une valeur propre, puisque dans notre cas le K_{eff} intervient dans la définition du problème résolu à chaque itération. En effet, on peut réécrire la mise à jour du flux sous la forme :

$$\Phi^{(n)} = A_{K_{eff}} \Phi^{(n-1)}, \quad (8.7)$$

avec $A_{K_{eff}} = \left(Id - D^{-1} \left(T_{inf} + \frac{1}{K_{eff}} F_{inf} \right) \right)^{-1} D^{-1} \left(T_{sup} + \frac{1}{K_{eff}} F_{sup} \right)$. T_{inf} et F_{inf} contiennent respectivement les blocs (sur les groupes d'énergie) strictement inférieurs des matrices T et F et T_{sup} et F_{sup} les blocs supérieurs (dont les blocs diagonaux) de T et F .

A chaque itération, le K_{eff} est mis à jour par (8.5), ce que l'on va noter :

$$K_{eff}^{(n-1)} = f \left(\Phi^{(n-1)}, \Phi^{(n-2)}, K_{eff}^{(n-2)} \right). \quad (8.8)$$

Notre solveur consiste à itérer entre (8.7) et (8.8), ce qui peut se réécrire sous la forme d'un point fixe ainsi :

$$X^{(n)} = \begin{pmatrix} K_{eff}^{(n-1)} \\ \Phi^{(n)} \\ \Phi^{(n-1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \left(\Phi^{(n-1)}, \Phi^{(n-2)}, K_{eff}^{(n-2)} \right) \\ A_{K_{eff}} \Phi^{(n-1)} \\ \Phi^{(n-1)} \end{pmatrix} = F(X^{(n-1)}).$$

Ainsi, si l'algorithme converge, il converge forcément sur une solution de $X = F(X)$, or il est aisé de voir que la résolution de (8.7) est équivalente à la résolution de (8.6). De plus, si le flux trouvé est positif (ce qui peut être assuré par la méthode de mise à jour du flux (8.7)), en vertu du théorème énoncé ci-dessus, on sait que la solution trouvée est bien l'unique solution physiquement acceptable du problème.

8.2.3 Calcul d'un flux adjoint

Le flux adjoint, que nous avons introduit dans le cadre de la théorie des perturbations en introduction 6.3.1, peut également être calculé avec ce solveur.

En effet, nous avons posé un système linéaire (8.4) pour calculer une représentation discrète du flux or, comme nous l'avons vu section 6.3.1, le flux adjoint est la solution de l'équation adjointe à celle du flux. De plus, l'adjoint d'une matrice réelle étant simplement sa transposée, on peut calculer l'adjoint de la représentation discrète du flux simplement en résolvant l'équation transposée de (8.4). Nous admettrons que c'est une bonne représentation discrète du flux adjoint. L'examen des matrices D , T et F montre que cela revient à inverser les transferts et à intervertir les rôles des χ et des $\nu\sigma_f$. En notant avec une étoile les données du calcul adjoint, exprimés dans le formalisme du solveur, cela donne simplement :

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\sigma_s^{g' \rightarrow g} \right)^* = \sigma_s^{g \rightarrow g'} \\ \left(\chi^g \right)^* = \nu \sigma_f^g \\ \left(\nu \sigma_f^g \right)^* = \chi^g. \end{array} \right.$$

On rappelle que les K_{eff} obtenus par les calculs directs et adjoints sont théoriquement identiques. C'est une manière de vérifier que la transformation ci-dessus a été bien faite et que le solveur a un bon comportement.

8.2.4 Evaluation du solveur

a. Comparaison à APOLLO3® en 2D

Le solveur que nous avons implémenté est facile à employer sur n'importe quelle géométrie générée par CAST3M. Nous avons commencé par vérifier ses résultats en le comparant à APOLLO3®.

Commençons par une confrontation à deux dimensions, pour laquelle il sera plus facile de comparer les formes des flux. Pour que nos deux calculs se basent sur les mêmes données physiques, un chaînage a été mis en place entre APOLLO3® et CAST3M. APOLLO3® construit les sections efficaces macroscopiques du problème et les écrit dans un fichier texte relu par CAST3M. Dans les deux codes nous définissons une coupe horizontale du cœur de Phénix (coupe radiale du cœur visible figure 6.1), avec deux couronnes de réflecteurs et des compositions non évoluées (voir section 6.2). Les assemblages sont homogénéisés avec le sodium inter-assemblage qui les baigne. Les calculs sont faits à 33 groupes d'énergie. Notons que le calcul APOLLO3® prend moins d'une seconde, contre une à deux minutes pour le calcul CAST3M. Cette différence est notamment due à des hypothèses sur la structure géométrique du problème qui sont utilisées dans un cas et pas dans l'autre. Notons enfin que la forme des mailles est différente entre les deux codes, APOLLO3® découpe les assemblages en quatre trapèzes, alors que CAST3M utilise trois losanges. La figure 8.2 illustre ces maillages.

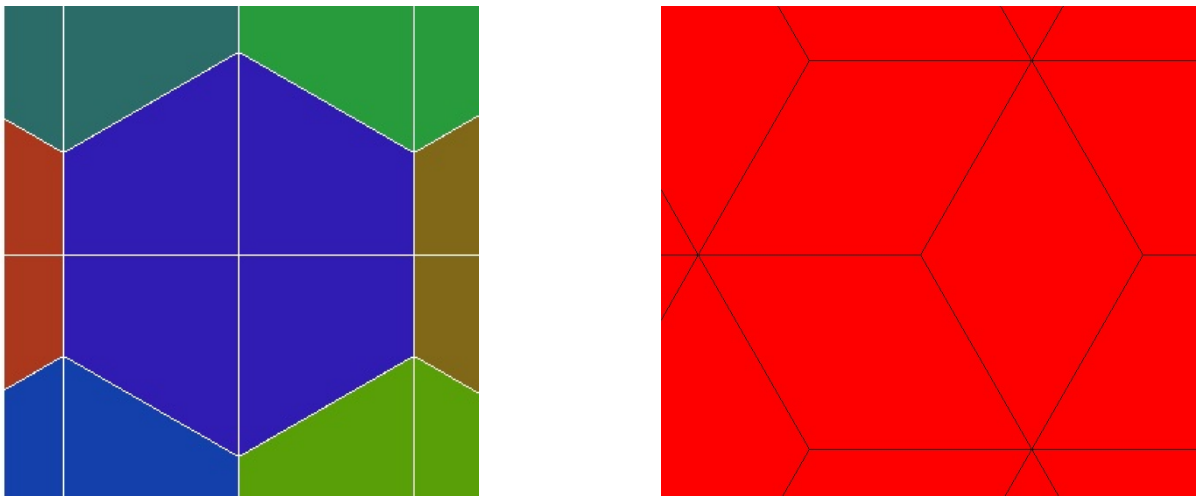


FIGURE 8.2 – Maillages des hexagones par APOLLO3® à gauche et CAST3M à droite.

La figure 8.3 donne les valeurs maximales obtenues pour le flux de chacun des groupes d'énergie. On note une très bonne concordance entre les résultats.

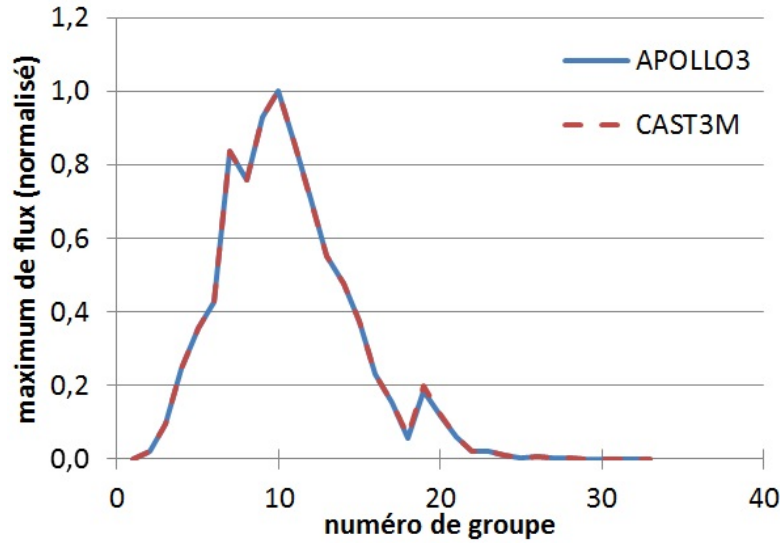


FIGURE 8.3 – Comparaison des maximums des flux obtenus par APOLLO3® et CAST3M sur un cas test 2D.

Les comparaisons de la forme des flux obtenus par les deux solveurs sont visibles de la figure 8.4 à la figure 8.7. Les numéros indiquent les groupes d'énergie (les premiers groupes sont les plus énergétiques). Pour chaque groupe d'énergie on a, côte à côte, le résultat du calcul APOLLO3®, à gauche, et celui du calcul CAST3M à droite. Les palettes de couleur sont les mêmes, le rouge correspondant au maximum de flux de chaque groupe et le bleu au minimum. Les valeurs des maximums ont quant à elles été comparées figure 8.3. Les résultats d'APOLLO3® sont moyennés sur les assemblages, ce qui fait perdre un peu en finesse, mais une bonne adéquation entre les résultats est notée ici encore.

Le coefficient multiplicateur (K_{eff}) obtenu par APOLLO3® est de 1.15883, contre 1.15825 pour CAST3M. L'écart, de 43pcm, est tout à fait acceptable. En outre, les calculs adjoint et direct de CAST3M trouvent le même K_{eff} au pcm près.

Ces comparaisons nous permettent d'affirmer que notre solveur neutronique stationnaire a été développé sans erreur.

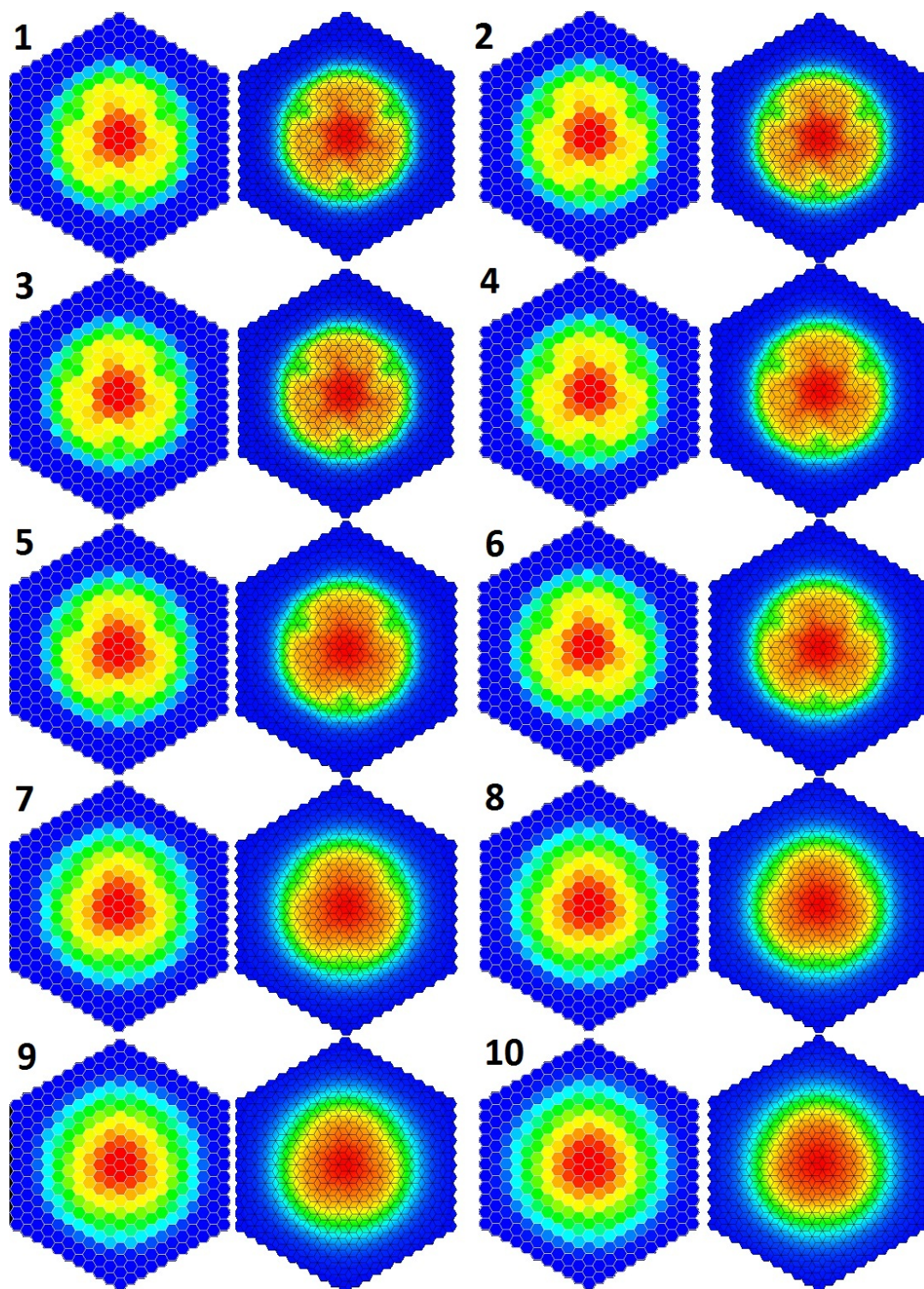


FIGURE 8.4 – Comparaison des nappes de flux obtenues par APOLLO3® et CAST3M sur un cas test 2D, numéro 1.

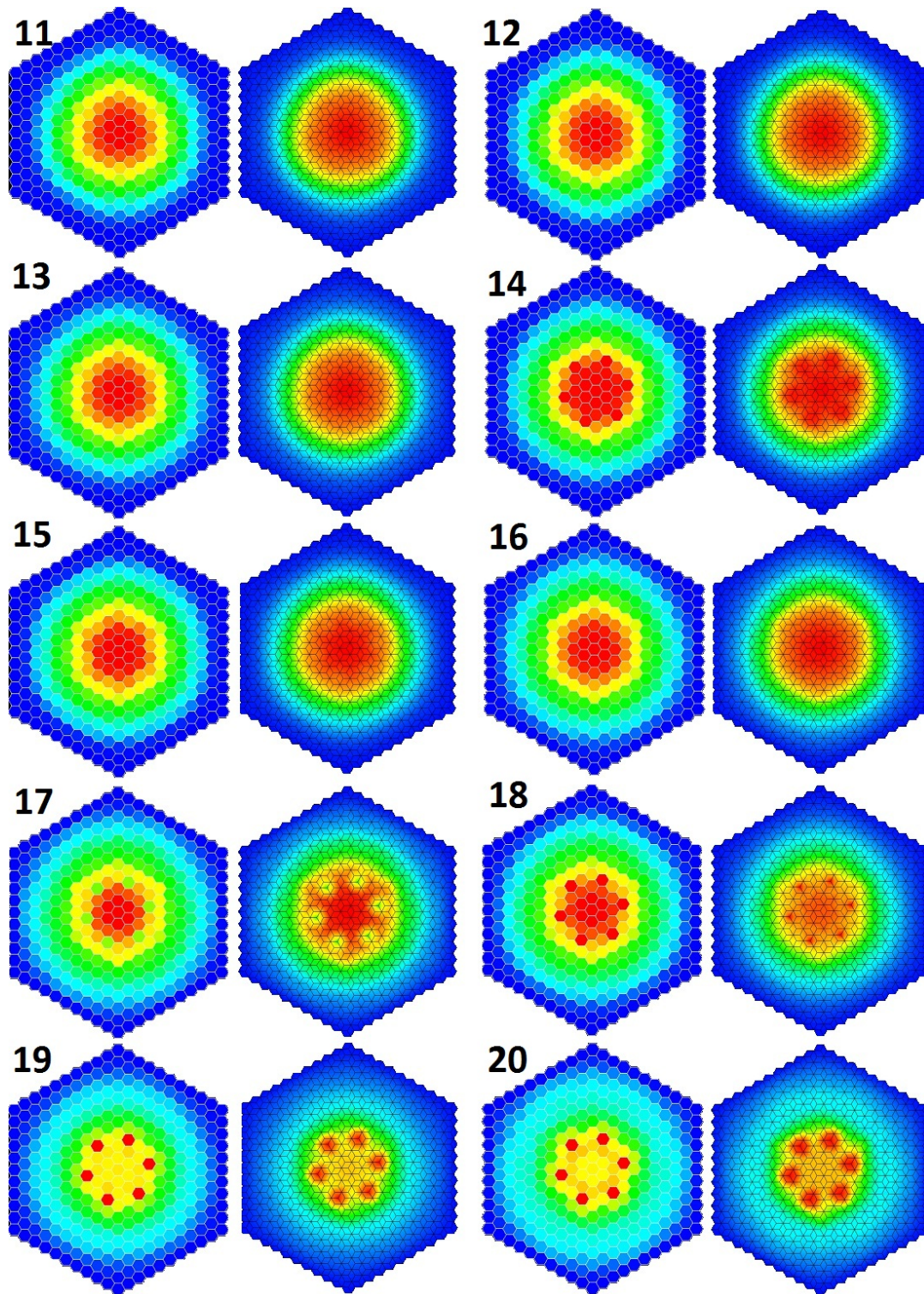


FIGURE 8.5 – Comparaison des nappes de flux obtenues par APOLLO3® et CAST3M sur un cas test 2D, numéro 2.

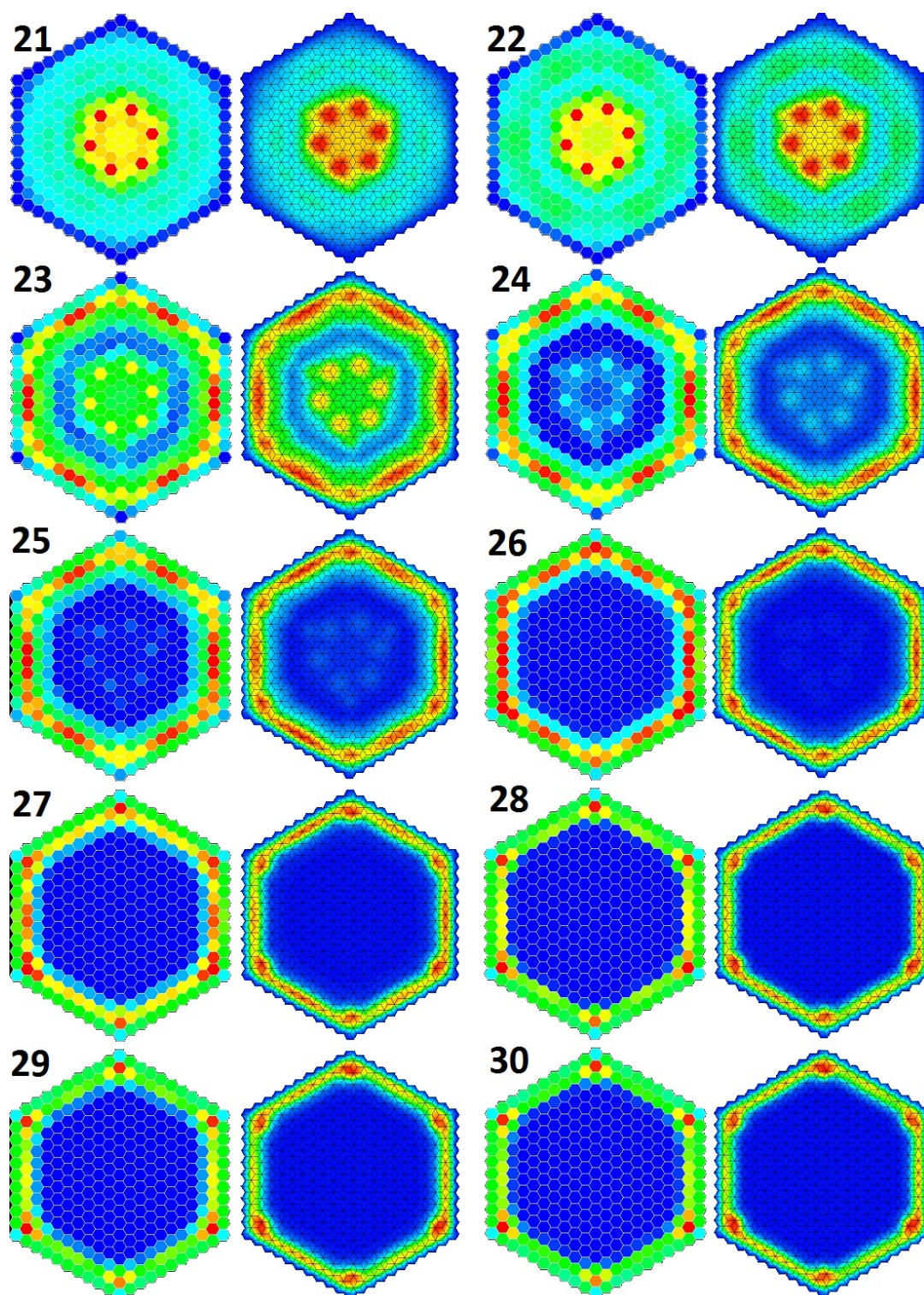


FIGURE 8.6 – Comparaison des nappes de flux obtenues par APOLLO3® et CAST3M sur un cas test 2D, numéro 3.

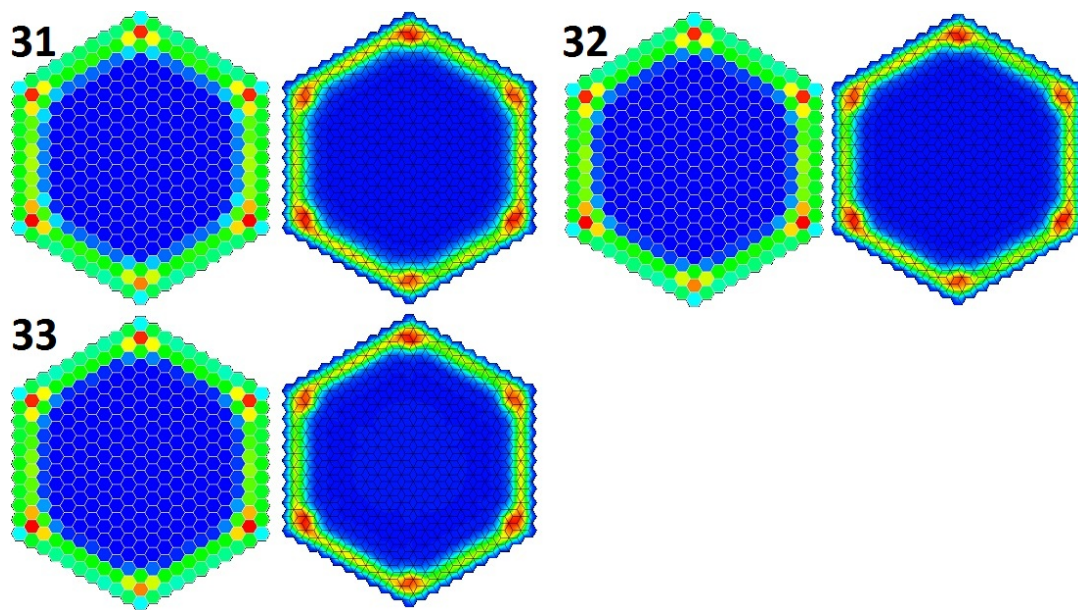


FIGURE 8.7 – Comparaison des nappes de flux obtenues par APOLLO3® et CAST3M sur un cas test 2D, numéro 4.

b. Comparaison à APOLLO3® en 3D

Nous avons également vérifié que le solveur se comporte bien à trois dimensions. Pour cela on reprend les données nucléaires du cœur neuf de Phénix (voir section 6.2), déjà utilisées pour la comparaison en 2D. Les assemblages sont homogénéisés avec leur sodium inter-assemblage, on utilise 33 groupes d'énergie et 32 mailles axiales (les compositions varient axialement) obtenues par extrusion axiale du maillage précédent (voir figure 8.2).

La figure 8.8 donne les valeurs maximales obtenues pour le flux de chacun des groupes d'énergie. On note, comme en 2D, une très bonne concordance entre les résultats.

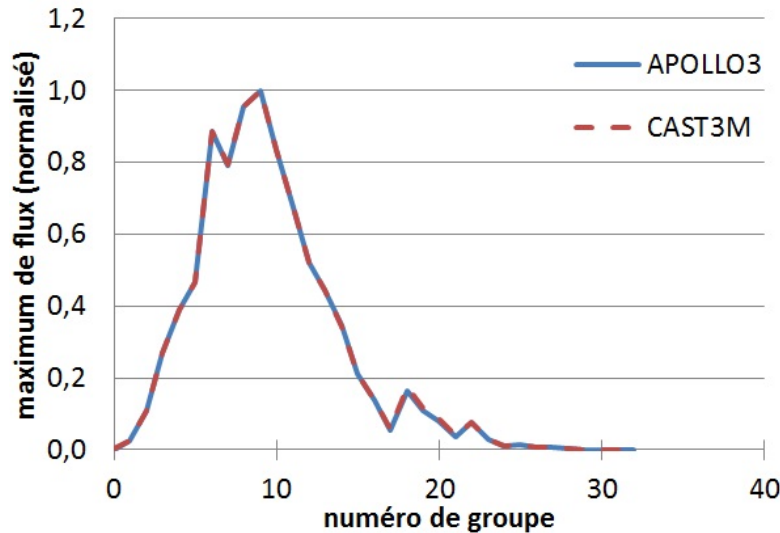


FIGURE 8.8 – Comparaison des maximums des flux obtenus par APOLLO3® et CAST3M sur un cas test 3D.

Il est intéressant de comparer les figures 8.3 et 8.8. Elles ont des formes très similaires, sauf dans le domaine thermique, où l'on note un pic supplémentaire en 3D (groupe 22). Quand on regarde la forme de ce groupe, on constate que le maximum est obtenu cette fois dans les réflecteurs axiaux, ce qui ne pouvait pas être vu en deux dimensions.

Le coefficient multiplicateur (K_{eff}) obtenu par APOLLO3® est de 1.01498, contre 1.01349 pour CAST3M. L'écart, de 145pcm, est tout à fait acceptable. Là encore, le calcul adjoint de CAST3M donne le même K_{eff} au pcm près. On constate qu'en passant en 3D on a diminué le coefficient multiplicateur à une valeur plus raisonnable, plus proche de 1.

8.3 Implémentation d'un solveur de diffusion neutronique cinétique dans CAST3M

8.3.1 Initialisation du calcul

a. Les équations de la cinétique

Une partie des neutrons issus de fissions provient en réalité de décroissances radioactives de certains produits de fission, appelés précurseurs de neutrons retardés. La fraction des neutrons émis ainsi est faible, mais leur retard est suffisant pour changer le comportement cinétique du réacteur. Ils apparaissent en effet quelques secondes, voire quelques dizaines de secondes après la fission, ce qui est long comparé à la durée de vie des neutrons dits « prompts », directement émis par la fission, qui est comprise en 10^{-3} et 10^{-6} seconde. La prise en compte de ces neutrons retardés est indispensable pour décrire un comportement réaliste du réacteur, qui serait impossible à piloter sans eux.

Les équations de la cinétique couplent donc aux équations sur le flux des équations d'évolution des concentrations des précurseurs de neutrons retardés.

Voici l'équation d'évolution du flux avec les notations précédentes (voir équation (8.3)) auxquelles on ajoute : V^g la vitesse des neutrons du groupe g , t le temps, $\chi_p^g(\vec{r})$ la fraction de neutrons de fission prompts émis dans le groupe g , β la fraction de neutrons de fission retardés, χ_l^g la fraction de neutrons de fission retardés émis dans le groupe g par le groupe de précurseurs l (comme pour χ^g , on a $\chi_{l/p}^g(\vec{r}) \in [0, 1]$ et $\sum_g \chi_{l/p}^g(\vec{r}) = 1 \forall \vec{r}, l, p$), λ_l la constante de décroissance du groupe de précurseurs l et $C^l(\vec{r})$ la concentration en précurseurs du groupe l :

$$\begin{aligned} \frac{1}{V^g} \frac{\partial \phi^g(\vec{r})}{\partial t} &= \nabla \cdot (D^g(\vec{r}) \nabla \phi^g(\vec{r})) - \sigma_{disp}^g(\vec{r}) \phi^g(\vec{r}) + \sum_{g' \neq g} \sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}) \\ &+ \chi_p^g(\vec{r}) (1 - \beta) \sum_{g'} \nu \sigma_f^{g'}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}) + \sum_l \chi_l^g \lambda_l C^l(\vec{r}). \end{aligned} \quad (8.9)$$

On n'a pas noté les dépendances temporelles des variables pour simplifier les notations.

Par rapport à l'équation stationnaire (8.3), on remarque :

- L'apparition d'un terme d'évolution avec une dérivée temporelle.
- La disparition du K_{eff} de l'équation. Comme expliqué section 1.4, il a été introduit dans l'équation stationnaire, dite critique, pour qu'elle ait une solution.
- L'utilisation de spectres d'émission prompt ($\chi_p^g(\vec{r})$) et retardé (χ_l^g) différents du spectre d'émission total qui apparaît en stationnaire ($\chi^g(\vec{r})$).
- La multiplication du terme de fission par $(1 - \beta)$ et l'apparition d'un nouveau terme source. On verra que ces deux modifications se compensent en stationnaire.

Voici l'équation d'évolution des concentrations des groupes de précurseurs de neutrons retardés, avec β_l la fraction de neutrons de fission émis par décroissance d'un précurseur du groupe l :

$$\frac{\partial C^l(\vec{r})}{\partial t} = -\lambda_l C^l(\vec{r}) + \sum_{g'} \beta_l \nu \sigma_f^{g'}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}). \quad (8.10)$$

La recherche de l'état stationnaire du système nous donne :

$$C^l(\vec{r}) = \frac{\sum_{g'} \beta_l \nu \sigma_f^{g'}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r})}{\lambda_l}.$$

On injecte ceci dans l'équation d'évolution du flux et on va identifier le terme source lié aux fissions dans l'équation stationnaire (avec $K_{eff} = 1$) à la somme des sources liées aux fissions et aux neutrons retardés dans l'équation cinétique. On obtient ainsi :

$$\chi^g(\vec{r}) \sum_{g'} \nu \sigma_f^{g'}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}) = \chi_p^g(\vec{r}) (1 - \beta) \sum_{g'} \nu \sigma_f^{g'}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}) + \sum_l \chi_l^g \beta_l \sum_{g'} \nu \sigma_f^{g'}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}),$$

Ce qui nous permet de définir le spectre d'émission prompt ainsi :

$$\chi_p^g(\vec{r}) = \frac{\chi^g(\vec{r}) - \sum_l \chi_l^g \beta_l}{1 - \beta}.$$

Identifier $\beta = \sum_l \beta_l$ permet de voir $\chi_p^g(\vec{r})$ comme une moyenne pondérée de $\chi^g(\vec{r})$ et χ_l^g , et d'assurer que $\chi_p^g(\vec{r})$ est, comme $\chi^g(\vec{r})$ et χ_l^g , compris entre 0 et 1. On vérifie aussi facilement que $\sum_g \chi_p^g(\vec{r}) = 1$ puisqu'on a $\sum_g \chi^g(\vec{r}) = \sum_g \chi_l^g = 1$.

b. Renormalisation de la matrice de fission

La résolution du problème critique, déjà présentée, amène à la détermination du coefficient multiplicateur (ou K_{eff}), qui correspond physiquement au nombre de neutrons produits par fission qui engendrent une nouvelle fission. Le cœur est donc physiquement dans un état stationnaire (appelé aussi critique) uniquement lorsque $K_{eff} = 1$. L'introduction du K_{eff} dans l'équation stationnaire n'est donc qu'un moyen de faire en sorte que l'équation ait toujours une solution, et d'obtenir par sa résolution une information sur son écart à l'équilibre.

Cependant, lorsqu'on démarre un calcul cinétique, on souhaite généralement partir d'un état stationnaire que l'on choisit, pour lequel le K_{eff} calculé n'est malheureusement pas toujours égal à 1. La première étape de l'initialisation d'un calcul cinétique est donc de rendre le K_{eff} égal à 1 automatiquement. Ceci est fait en divisant les sections efficaces de production de neutrons de fissions, les $\nu \sigma_f$, par le K_{eff} .

8.3.2 Méthode de résolution

a. Résolution de l'équation sur les précurseurs

Il est possible de résoudre analytiquement l'équation sur les précurseurs (8.10). Nous nous inspirons ici de ce qui est fait dans le code CRONOS.

Par rapport à CRONOS nous simplifions l'équation en supposant que les sections efficaces $\nu\sigma_f$ sont indépendantes du temps sur chaque pas de temps. En revanche, nous prenons en compte la dépendance en temps du flux, avec une approximation proche d'un θ -schéma. Ce type de schéma consiste, pour les termes qui ne comportent pas de dérivée temporelle, à prendre une combinaison linéaire, paramétrée par θ (compris entre 0 et 1), de leur valeur au pas de temps précédent et de celle au pas de temps que l'on calcule. En outre, pour simplifier les écritures, nous considérons que chaque pas de temps commence à $t = 0$. On note Δt la durée du pas de temps que l'on résout. Pour simplifier les notations, on ne note pas la dépendance spatiale (en \vec{r}) des variables, mais uniquement leur dépendance temporelle.

La solution générale de l'équation complète est la somme de la solution générale du problème homogène (sans terme source), $C^{l,H}$, et d'une solution particulière de l'équation complète, $C^{l,P}$.

On a :

$$C^{l,H}(t) = Ae^{-\lambda_l t}.$$

La solution particulière est cherchée sous la forme $A(t)e^{-\lambda_l t}$, ce qui en l'injectant dans l'équation nous donne :

$$A(t) = \int_0^t e^{\lambda_l s} \sum_{g'} \beta_l \nu \sigma_f^{g'} \phi^{g'}(s) ds.$$

En supposant que l'on connaisse $C^l(0)$, on a donc :

$$C^l(t) = e^{-\lambda_l t} \left(C^l(0) + \int_0^t e^{\lambda_l s} \sum_{g'} \beta_l \nu \sigma_f^{g'} \phi^{g'}(s) ds \right).$$

Pour pouvoir calculer l'intégrale, on va supposer que $\phi^{g'}(t)$ est de la forme suivante sur $[0, \Delta t]$:

$$\phi^{g'}(t) = \phi^{g'}(0)w_1(t) + \phi^{g'}(\Delta t)w_2(t).$$

Avec $w_1(t)$ et $w_2(t)$ des polynômes de degré 2 en t vérifiant :

- $w_1(0) = 1$,
- $w_2(0) = 0$,
- $w_1(\Delta t) = 0$,
- $w_2(\Delta t) = 1$,
- $\int_0^{\Delta t} w_1(s) ds = (1 - \theta)\Delta t$,
- $\int_0^{\Delta t} w_2(s) ds = \theta\Delta t$.

On obtient avec ces conditions :

$$\begin{aligned} w_1(t) &= 1 + \frac{2-6\theta}{\Delta t}t + \frac{6\theta-3}{\Delta t^2}t^2, \\ w_2(t) &= \frac{6\theta-2}{\Delta t}t + \frac{3-6\theta}{\Delta t^2}t^2. \end{aligned}$$

La solution générale est ainsi de la forme :

$$\begin{aligned} C^l(t) &= e^{-\lambda_l t} \left(C^l(0) + \left(\sum_{g'} \beta_{lg} \nu \sigma_f^{g'} \phi^{g'}(0) \right) \int_0^t e^{\lambda_l s} w_1(s) ds \right. \\ &\quad \left. + \left(\sum_{g'} \beta_{lg} \nu \sigma_f^{g'} \phi^{g'}(\Delta t) \right) \int_0^t e^{\lambda_l s} w_2(s) ds \right). \end{aligned} \quad (8.11)$$

Pour obtenir $C^l(\Delta t)$, il reste donc à calculer les intégrales $\int_0^{\Delta t} e^{\lambda_l s} w_i(s) ds$.

En posant $w_i(t) = a + bt + ct^2$, on obtient après intégrations par partie successives :

$$\begin{aligned} \int_0^{\Delta t} e^{\lambda_l s} w_i(s) ds &= \left(e^{\lambda_l \Delta t} - 1 \right) \frac{a}{\lambda_l} + \left(\left(1 - e^{\lambda_l \Delta t} \right) \frac{b}{\lambda_l^2} + \frac{e^{\lambda_l \Delta t}}{\lambda_l} b \Delta t \right) \\ &\quad + \left(\left(\left(e^{\lambda_l \Delta t} - 1 \right) \frac{2c}{\lambda_l^3} - \frac{e^{\lambda_l \Delta t}}{\lambda_l} \frac{2c \Delta t}{\lambda_l} \right) + \frac{e^{\lambda_l \Delta t}}{\lambda_l} c \Delta t^2 \right). \end{aligned}$$

L'expression donnée n'est pas la plus compacte mais est choisie pour donner de bons résultats numériques lorsque Δt tend vers 0.

Ecrire le résultat sous cette forme n'est malheureusement pas suffisant lorsque le pas de temps devient vraiment petit (on teste $\lambda_l \Delta t < 10^{-3}$), et il est alors nécessaire de fournir directement le développement limité simplifié suivant :

$$\int_0^{\Delta t} e^{\lambda_l s} w_i(s) ds = a \Delta t + \frac{b \Delta t^2}{2} + \frac{c \Delta t^3}{3} + \frac{a \lambda_l \Delta t^2}{2} + \frac{b \lambda_l \Delta t^3}{3} + \frac{c \lambda_l \Delta t^4}{4} + o(\Delta t^2).$$

Rappelons que les expressions trouvées pour b et c sont respectivement en $\frac{1}{\Delta t}$ et en $\frac{1}{\Delta t^2}$.

b. Schéma en temps de l'équation sur le flux, et prise en compte des précurseurs

Comme dans le paragraphe précédent, nous considérons ici que chaque pas de temps commence à $t = 0$, et nous notons Δt la durée du pas de temps que l'on résout. Par souci de clarté, nous notons ici toutes les dépendances des variables. On pourra remarquer notamment que les données nucléaires ne dépendent pas du temps sur le pas de temps considéré.

On approxime le terme de dérivée temporelle par une différence finie, c'est à dire qu'on écrit :

$$\frac{\partial \phi^g(\vec{r})}{\partial t} \approx \frac{\phi^g(\vec{r}, \Delta t) - \phi^g(\vec{r}, 0)}{\Delta t}.$$

On utilise un θ -schéma sur les autres termes, ce qui nous donne l'approximation suivante de l'équation (8.9), avec $\theta \in [0, 1]$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{V^g} \frac{\phi^g(\vec{r}, \Delta t) - \phi^g(\vec{r}, 0)}{\Delta t} &= (1 - \theta) \nabla \cdot (D^g(\vec{r}) \nabla \phi^g(\vec{r}, 0)) + \theta \nabla \cdot (D^g(\vec{r}) \nabla \phi^g(\vec{r}, \Delta t)) \\ &\quad - (1 - \theta) \sigma_{disp}^g(\vec{r}) \phi^g(\vec{r}, 0) - \theta \sigma_{disp}^g(\vec{r}) \phi^g(\vec{r}, \Delta t) \\ &\quad + (1 - \theta) \sum_{g' \neq g} \sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}, 0) + \theta \sum_{g' \neq g} \sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}, \Delta t) \\ &\quad + (1 - \theta) \chi_p^g(\vec{r}) (1 - \beta) \sum_{g'} \nu \sigma_f^{g'}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}, 0) \\ &\quad + \theta \chi_p^g(\vec{r}) (1 - \beta) \sum_{g'} \nu \sigma_f^{g'}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}, \Delta t) \\ &\quad + (1 - \theta) \sum_l \chi_l^g \lambda_l C^l(\vec{r}, 0) + \theta \sum_l \chi_l^g \lambda_l C^l(\vec{r}, \Delta t). \end{aligned} \tag{8.12}$$

On voit que l'on dédouble chaque terme de l'équation, en dehors de la dérivée temporelle, en un terme dépendant de la solution du pas de temps précédent ($t = 0$), affecté d'un facteur $1 - \theta$, et d'un terme dépendant du pas de temps que l'on va calculer, ($t = \Delta t$), affecté d'un facteur θ .

Intéressons nous au dernier terme, qui dépend de la solution des précurseurs en Δt . Nous connaissons déjà $C^l(\vec{r}, \Delta t)$ grâce à l'équation (8.11) :

$$C^l(\vec{r}, \Delta t) = e^{-\lambda_l \Delta t} (C^l(\vec{r}, 0) + \beta_l TF(\vec{r}, 0) Int_1^l + \beta_l TF(\vec{r}, \Delta t) Int_2^l).$$

On a noté ici $TF(\vec{r}, t) = \sum_{g'} \nu \sigma_f^{g'}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}, t)$ et $Int_i^l = \int_0^{\Delta t} e^{\lambda_l s} w_i(s) ds$.

En réinjectant cette expression dans le dernier terme, on obtient :

$$\begin{aligned} \theta \sum_l \chi_l^g \lambda_l C^l(\vec{r}, \Delta t) &= \theta \sum_l \chi_l^g \lambda_l e^{-\lambda_l \Delta t} C^l(\vec{r}, 0) \\ &\quad + \theta TF(\vec{r}, 0) \underbrace{\sum_l \chi_l^g \lambda_l e^{-\lambda_l \Delta t} \beta_l Int_1^l}_{Cst_1^g} \\ &\quad + \theta TF(\vec{r}, \Delta t) \underbrace{\sum_l \chi_l^g \lambda_l e^{-\lambda_l \Delta t} \beta_l Int_2^l}_{Cst_2^g}. \end{aligned}$$

Les termes sources liées aux fissions et aux précurseurs peuvent donc se réécrire :

$$\begin{aligned}
S_{FP}^g(\vec{r}) &= TF(\vec{r}, 0) \left((1 - \theta) \chi_p^g(\vec{r}) (1 - \beta) + \theta Cst_1^g \right) \\
&+ TF(\vec{r}, \Delta t) \left(\theta \chi_p^g(\vec{r}) (1 - \beta) + \theta Cst_2^g \right) \\
&+ \sum_l \chi_l^g \lambda_l C^l(\vec{r}, 0) \left(1 - \theta + \theta e^{-\lambda_l \Delta t} \right)
\end{aligned} \tag{8.13}$$

On a ainsi réussi à éliminer toute dépendance en les concentrations des précurseurs en $t = \Delta t$. Cette manipulation permet de prendre directement en compte l'effet de l'évolution des précurseurs pendant le calcul du flux, sans avoir à mettre en place un couplage entre la résolution des deux équations. On réalise ainsi ce que l'on a appelé, dans la partie sur les techniques de couplage (voir section 2.1), un couplage intriqué ou entre modèles.

c. Discrétisation spatiale et méthode de résolution

Comme pour le cas stationnaire, on note ξ_j , pour $j \in \llbracket 1, N_h \rrbracket$, les fonctions de base des éléments finis choisis (les mêmes qu'en stationnaire). On note également $\Phi^g = (\phi_j^g)_{1 \leq j \leq N_h}$ le vecteur des coordonnées de ϕ^g sur les ξ_j . Φ est le vecteur concaténant les Φ^g . De même on note $\mathbf{C}^l = (C_j^l)_{1 \leq j \leq N_h}$ le vecteur des coordonnées de C^l sur les ξ_j . \mathbf{C} est le vecteur concaténant les \mathbf{C}^l . On rappelle que l'on a N_g groupes d'énergie. On note N_l le nombre de groupes de précurseurs de neutrons retardés. On peut alors définir les matrices D , SF , P et M qui vont intervenir dans la résolution. Dans la définition des indices des matrices, i et j varieront entre 1 et N_h , g et g' entre 1 et N_g et l entre 1 et N_l . On a alors :

- $(D)_{k=i+N_h(g-1), m=j+N_h(g-1)} = \int_{\Omega} D^g(\vec{r}) \nabla \xi_i(\vec{r}) \nabla \xi_j(\vec{r}) d\Omega + \int_{\Omega} \sigma_{disp}^g(\vec{r}) \xi_i(\vec{r}) \xi_j(\vec{r}) d\Omega$. On note D^g chacun des blocs, diagonaux, de D .
- $(SF)_{k=i+N_h(g-1), m=j+N_h(g'-1)} = \int_{\Omega} \sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}) \xi_i(\vec{r}) \xi_j(\vec{r}) d\Omega + (1 - \beta) \int_{\Omega} \chi_p^g(\vec{r}) \nu \sigma_f^{g'}(\vec{r}) \xi_i(\vec{r}) \xi_j(\vec{r}) d\Omega$ (ici on impose $\sigma_s^{g \rightarrow g}(\vec{r}) = 0 \ \forall \vec{r}$). On note $SF^{g' \rightarrow g}$ le bloc obtenu en fixant g et g' dans la définition des indices de SF .
- $(F)_{k=i+N_h(g-1), m=j+N_h(g'-1)} = \int_{\Omega} \nu \sigma_f^{g'}(\vec{r}) \xi_i(\vec{r}) \xi_j(\vec{r}) d\Omega$. On note $F^{g' \rightarrow g}$ le bloc obtenu en fixant g et g' dans la définition des indices de F .
- $(P)_{k=i+N_h(g-1), m=j+N_h(l-1)} = \chi_l^g \lambda_l \int_{\Omega} \xi_i(\vec{r}) \xi_j(\vec{r}) d\Omega$. On note $P^{l \rightarrow g}$ le bloc obtenu en fixant g et l dans la définition des indices de P .
- $(M)_{i,j} = \int_{\Omega} \xi_i(\vec{r}) \xi_j(\vec{r}) d\Omega$ (M s'appelle la matrice de masse).

Avec ces notations, notre schéma prend la forme discrète suivante :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{V^g} M \frac{\Phi^g(\Delta t) - \Phi^g(0)}{\Delta t} &= -D^g \left((1 - \theta) \Phi^g(0) + \theta \Phi^g(\Delta t) \right) \\
&+ \left(SF \left((1 - \theta) \Phi(0) + \theta \Phi(\Delta t) \right) \right)_g \\
&+ \left(F \left(\theta Cst_1^g \Phi(0) + \theta Cst_2^g \Phi(\Delta t) \right) \right)_g \\
&+ \left(P \left((1 - \theta + \theta e^{-\lambda_l \Delta t}) \mathbf{C}(0) \right) \right)_g.
\end{aligned} \tag{8.14}$$

On définit ainsi un système matriciel global dont la résolution nous donne directement $\Phi(\Delta t)$:

$$A_{total} \Phi(\Delta t) = S_{total}, \tag{8.15}$$

avec A_{total} constitué des blocs $A^{g' \rightarrow g}$ suivants ($\delta_{g',g}$ vaut 1 si $g' = g$ et 0 sinon) :

$$A^{g' \rightarrow g} = \delta_{g',g} \left(\frac{1}{V^g \Delta t} M + \theta D^g \right) - \theta SF^{g' \rightarrow g} - \theta Cst_2^g F^{g' \rightarrow g}, \tag{8.16}$$

et S_{total} obtenu comme la concaténation des vecteurs suivants :

$$\begin{aligned}
S^g &= \frac{1}{V^g \Delta t} M \Phi^g(0) - (1 - \theta) D^g \Phi^g(0) + (1 - \theta) \sum_{g'} SF^{g' \rightarrow g} \Phi^{g'}(0) \\
&+ \theta Cst_1^g \sum_{g'} F^{g' \rightarrow g} \Phi^{g'}(0) + \sum_l (1 - \theta + \theta e^{-\lambda_l \Delta t}) P^{l \rightarrow g} C^l(0).
\end{aligned} \tag{8.17}$$

Nous résolvons ce système avec une méthode itérative qui est proche de celle utilisée lors du calcul critique.

Avant d'aller plus loin, on définit les matrices A^g ainsi :

$$A^g = \frac{M}{V^g \Delta t} + \theta D^g,$$

On note n le numéro d'itération. Voici la méthode :

1. Calcul des sources S^g selon l'équation (8.17).
2. Itérations jusqu'à convergence (le critère est vérifié uniquement lors de l'accélération expliquée au paragraphe d.) :

$$\frac{\|A_{total} \Phi(\Delta t)^{(n)} - S_{total}\|_2}{\|S_{total}\|_2} < \varepsilon. \tag{8.18}$$

- (a) Parcours des groupes g croissants :

i. Calcul de la source implicite $S_{imp}^{g(n-1)}$:

$$\begin{aligned} S_{imp}^{g(n-1)} &= \theta \sum_{g' < g} SF^{g' \rightarrow g} \Phi^{g'}(\Delta t)^{(n)} + \theta \sum_{g' \geq g} SF^{g' \rightarrow g} \Phi^{g'}(\Delta t)^{(n-1)} \\ &\quad + \theta Cst_2^g \sum_{g' < g} F^{g' \rightarrow g} \Phi^{g'}(\Delta t)^{(n)} + \theta Cst_2^g \sum_{g' \geq g} F^{g' \rightarrow g} \Phi^{g'}(\Delta t)^{(n-1)} \end{aligned}$$

ii. Résolution de

$$A^g \Phi^g(\Delta t)^{(n)} = S_{imp}^{g(n-1)} + S^g. \quad (8.19)$$

(b) A la première itération, puis toutes les 7, accélération par rebalancing (expliquée plus bas, au paragraphe d.).

3. Mise à jour de $\mathbf{C}(\Delta t)$ avec la méthode analytique présentée au paragraphe a..

d. Accélération par rebalancing

La technique de résolution proposée convergerait très lentement sans accélération, lorsque θ est proche de 1 (et nous verrons plus loin que nous utilisons $\theta = 1$). Cela s'explique par la faiblesse des sources constantes, S^g , du système (8.19) par rapport aux sources mises à jour pendant les itérations, $S_{imp}^{g(n-1)}$. Cette faiblesse vient du fait que les S^g sont constituées, lorsque $\theta = 1$, uniquement de termes dus aux neutrons retardés, qui sont très peu nombreux par rapport aux neutrons de fission prompts, et d'un terme en $\frac{1}{V^g \Delta t}$, très petit si le pas de temps ne l'est pas, car la vitesse des neutrons est très grande.

La technique d'accélération choisie, dite de rebalancing [8], est celle implémentée dans le code CRONOS pour la résolution des problèmes à source et de cinétique (elle est citée dans la documentation du code : [74]). Elle a également été réécrite dans APOLLO3®. Elle consiste à transformer $\Phi(\Delta t)$ en $\bar{\Phi}(\Delta t)$, avec $\bar{\Phi}^g(\Delta t) = u^g \Phi^g(\Delta t)$. Les u^g sont des constantes déterminées de façon à minimiser la norme du résidu calculée selon (8.18). Nous notons u le vecteur composé des u^g .

Explicitons la norme du résidu pour le flux ainsi modifié :

$$J(u) = \|A_{total} \bar{\Phi}(\Delta t) - S_{total}\|^2 = \sum_{g,i} \left[\sum_{g'} u^{g'} (A^{g' \rightarrow g} \Phi^{g'}(\Delta t))_i - S_i^g \right]^2.$$

Rappelons qu'une fonction f de \mathbb{R}^{N_g} , dans notre cas, à valeurs dans \mathbb{R} est convexe si et seulement si :

$$f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y) \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^{N_g}, \quad \forall \alpha \in [0, 1].$$

Il est facile de vérifier ici que J est convexe (une somme de fonctions convexes l'est, tout comme la fonction carrée). On peut alors utiliser un résultat bien connu (voir par exemple [71]),

qui nous donne que u_{opt} qui minimise J est caractérisé par $J'(u_{opt}) = 0$ (J' est ici le gradient de J).

Exprimons donc $J'(u)$:

$$(J'(u))_{g''} = \sum_{g,i} 2 \left(\sum_{g'} u^{g'} (A^{g' \rightarrow g} \Phi^{g'}(\Delta t))_i - S_i^g \right) (A^{g'' \rightarrow g} \Phi^{g''}(\Delta t))_i.$$

Ainsi, u_{opt} vérifie la relation que l'on peut mettre sous la forme (on a noté $A\Phi^{g'}$ le vecteur concaténant les $A^{g' \rightarrow g} \Phi^{g'}(\Delta t)$) :

$$\sum_{g'} u_{opt}^{g'} \langle A\Phi^{g'}, A\Phi^{g''} \rangle - \langle S_{total}, A\Phi^{g''} \rangle = 0 \quad \forall g''.$$

En notant $a_{g'',g'} = \langle A\Phi^{g'}, A\Phi^{g''} \rangle$ et $b_{g''} = \langle S_{total}, A\Phi^{g''} \rangle$, on se ramène au système linéaire suivant :

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{opt}^1 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (8.20)$$

Il est résolu pour déterminer u_{opt} . Les termes de ce systèmes sont connus grâce aux équations (8.16) et (8.17).

8.3.3 Evaluation du solveur

a. Choix du paramètre θ

On va chercher à évaluer la précision du schéma numérique en fonction de θ . Commençons par réécrire l'équation (8.9) sous forme condensée :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = A\Phi + P.$$

La dépendance en temps des concentrations des précurseurs (donnant le terme P) étant faible, on va les supposer constantes ici.

Donnons le schéma numérique correspondant à la méthode utilisée :

$$\frac{\Phi(\Delta t) - \Phi(0)}{\Delta t} = A \left((1 - \theta)\Phi(0) + \theta\Phi(\Delta t) \right) + P.$$

En injectant dans le schéma un développement limité à l'ordre 2 de Φ en $\frac{\Delta t}{2}$, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi \left(\frac{\Delta t}{2} \right)}{\partial t} + o(\Delta t^2) &= A\Phi \left(\frac{\Delta t}{2} \right) - \Delta t A \left((1 - 2\theta) \frac{1}{2} \frac{\partial \Phi \left(\frac{\Delta t}{2} \right)}{\partial t} \right) \\ &\quad + \Delta t^2 A \left(\frac{1}{8} \frac{\partial^2 \Phi \left(\frac{\Delta t}{2} \right)}{\partial t^2} \right) + o(\Delta t^2) + P. \end{aligned}$$

Ainsi, lorsque $\theta \neq \frac{1}{2}$, le schéma nous donne une approximation à l'ordre 1 en temps de l'équation exacte en $\frac{\Delta t}{2}$, le terme d'erreur non nul le plus grand étant proportionnel à Δt . Lorsque $\theta = \frac{1}{2}$, on obtient en revanche une meilleure approximation de l'équation exacte, à l'ordre 2 en temps. Dans ce cas, on parle d'un schéma de Crank-Nicolson.

Lorsque la source $S_{imp}^{g(n-1)} + S^g$ n'est pas positive en tout point on risque tout de même que la résolution du problème de diffusion (8.19) ne donne pas un flux positif, ce qui peut poser des problèmes de convergence. On voit notamment que, puisque le flux de chaque groupe sert à calculer les sources des autres groupes, le problème de signe risque de s'amplifier. Malheureusement, le terme $-D^g(1 - \theta)\Phi^g(0)$ apporte des termes négatifs lorsque θ est différent de 1.

Une façon simple d'assurer que la source reste positive est de diminuer Δt jusqu'à ce que la différence $\frac{\Phi^g(0)}{V^g \Delta t} - D^g(1 - \theta)\Phi^g(0)$ soit positive en tout point. Cette méthode a l'avantage de fournir un pas de temps indépendant des itérations globales de la résolution. Cependant, les vitesses des neutrons V^g étant très grandes (de l'ordre du dixième de la vitesse de la lumière pour les groupes les plus énergétiques), le pas de temps nécessaire est extrêmement petit.

En conclusion nous avons vu que :

- La solution est la plus précise lorsque $\theta = \frac{1}{2}$.
- Lorsque $\theta \neq 1$, si nous souhaitons respecter le principe du maximum (solution positive), nous avons une contrainte sur le pas de temps qui risque de rendre le schéma inutilisable. Notons qu'il est possible que l'algorithme de résolution fonctionne même si le principe du maximum n'est pas exactement respecté.

Ce type de conclusion, assez classique, nous pousse donc à utiliser $\theta = 1$, soit ce que l'on appelle un schéma implicite. Les résultats que nous présenterons dans la suite auront tous été calculés avec $\theta = 1$.

b. Comparaison à APOLLO3® avec de grands pas de temps

Comme pour le premier paragraphe de la section 8.2.4, nous avons défini dans les deux codes une coupe horizontale du cœur de Phénix (coupe radiale du cœur visible figure 6.1), avec deux couronnes de réflecteurs et des compositions non évoluées (décrites section 6.2). Les assemblages sont homogénéisés avec le sodium inter-assemblage qui les baigne. Les calculs sont faits à 33 groupes d'énergie.

Le transitoire considéré est le suivant :

1. Lors de l'initialisation, les 6 emplacements pour les assemblages de commande sont vides et ne contiennent que du sodium.
2. Au bout d'une seconde de transitoire, on met (instantanément) des absorbants à l'emplacement des barres de commande.
3. Au bout de 5 secondes de transitoire, on enlève (instantanément) les absorbants et on revient à la configuration initiale.

4. On continue le transitoire pendant encore 5 secondes.

Ce transitoire doit permettre de vérifier à la fois le bon traitement des termes de cinétique rapide, grâce aux mouvements instantanés des barres de commande, et celui des termes d'inertie liés aux précurseurs, plus lents à se manifester, grâce aux phases d'attente de quelques secondes. Notamment le niveau de puissance atteint à la fin du transitoire est piloté par la décroissance des concentrations de précurseurs lorsque les barres sont insérées.

On a utilisé les mêmes schémas numériques dans les deux codes, avec des pas de temps d'une seconde pour commencer. Notons que la première seconde de transitoire, et donc le premier pas de temps, sert uniquement à vérifier que l'initialisation des solveurs est bien faite et que l'état initial est bien stationnaire.

Des calculs critiques ont, préalablement, été faits sur chacune des deux compositions utilisées. Les effets de réactivité trouvés sont proches, -1183pcm pour APOLLO3® et -1190pcm pour CAST3M. Cela nous assure que l'on utilise bien les mêmes données pendant le transitoire.

La figure 8.9 nous donne l'évolution de la puissance globale trouvée par les deux codes. On a une bonne adéquation des résultats.

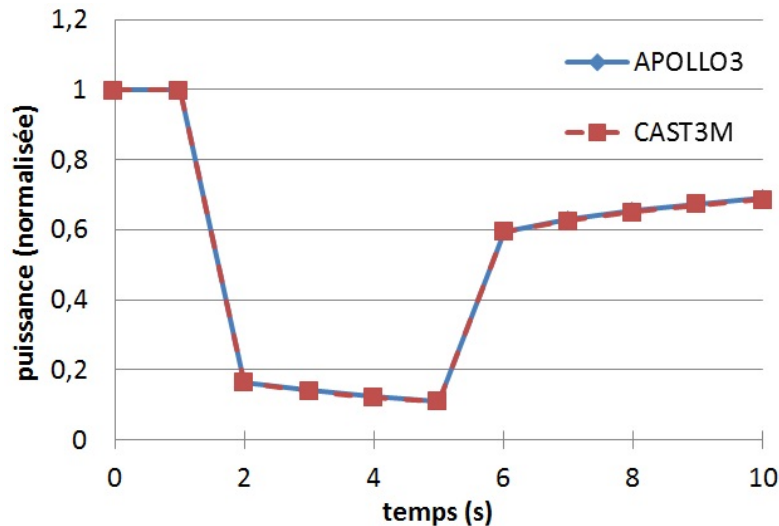


FIGURE 8.9 – Comparaison de l'évolution de la puissance trouvée par APOLLO3® et CAST3M sur un cas test, avec de grands pas de temps.

c. Comparaison à APOLLO3® avec des petits pas de temps

On utilise la même description du cœur et les mêmes schémas numériques que pour la comparaison précédente. Cette fois-ci, on va chercher à décrire plus précisément la chute de puissance observée à 1s. Après la perturbation du cœur, on calculera la puissance au bout de $1s + 10^{-5}s$, $10^{-4}s$, $10^{-3}s$, $10^{-5}s$, $10^{-1}s$ et $1s$.

La figure 8.10 donne la comparaison des résultats, avec le temps en échelle logarithmique. L'évolution de la puissance trouvée par les deux codes est très similaire, et les deux courbes

apparaissent confondues. On remarque également que le niveau de puissance minimal figure 8.10 est proche de celui trouvé après deux pas de temps d'une seconde figure 8.9 (dans le cas d'APOLLO3®, on a ici une puissance de 17.0%, contre 16.3% précédemment). Cela semble indiquer qu'il est licite de calculer les variations brusques de puissance avec un unique pas de temps. Ceci est illustré figure 8.11 où l'on a tracé, sur la courbe d'évolution de puissance trouvée par CAST3M avec des pas de temps d'une seconde, la chute de puissance trouvée par CAST3M avec de petits pas de temps.

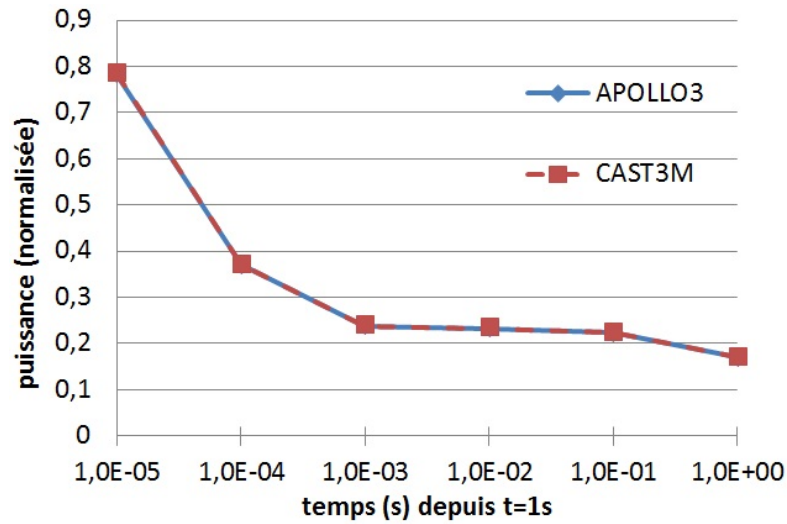


FIGURE 8.10 – Comparaison de l'évolution de la puissance trouvée par APOLLO3® et CAST3M sur un cas test, après une seconde, avec de petits pas de temps.

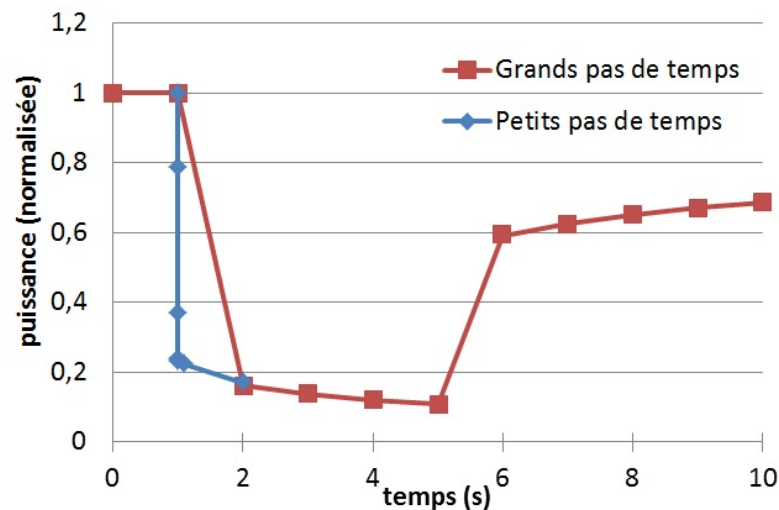


FIGURE 8.11 – Comparaison de l'évolution de la puissance trouvée par CAST3M sur un cas test avec différents pas de temps.

d. Efficacité de l'accélération

L'utilisation, ou non, de l'accélération par rebalancing ne modifie pas les résultats obtenus par CAST3M sur les figures 8.9 à 8.11. En revanche, l'accélération affecte fortement les temps de calcul. Nous l'illustrons avec les figures 8.12 et 8.13 où les nombres d'itérations nécessaires pour converger les calculs précédents sont tracés. La figure 8.12 concerne le calcul dont les résultats sont donnés figure 8.9, tant dis que la figure 8.13 correspond à la figure 8.10.

Il est visible que l'on a un gain en nombre d'itérations, et donc en temps de calcul, de plus d'un facteur 10, pour une convergence similaire. Cela prouve bien l'efficacité et la nécessité de la technique d'accélération mise en place.

Avec accélération, le calcul du transitoire avec grands pas de temps prend environ 30min, et celui avec des petits pas de temps, un peu plus de 15. Les mêmes calculs avec APOLLO3® prennent quelques minutes. On est donc plus lent d'un ordre de grandeur environ, ce qui reste acceptable.

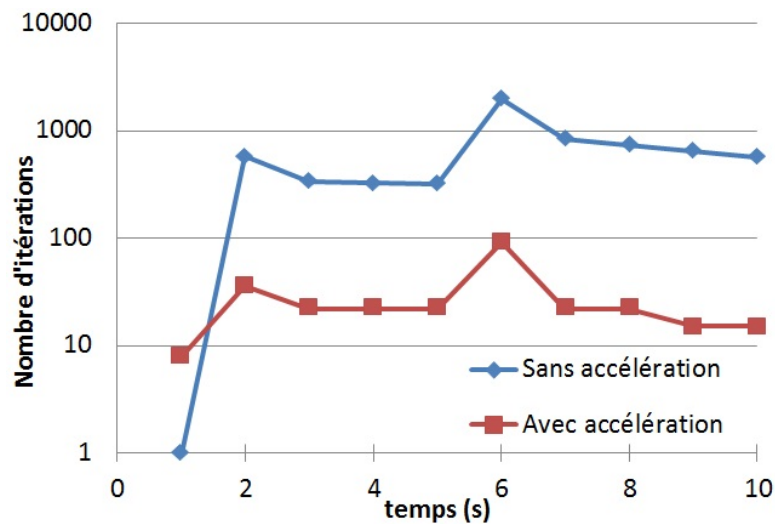


FIGURE 8.12 – Impact de la technique d'accélération sur le nombre d'itérations nécessaires pour converger chaque pas de temps d'un cas test, avec des grands pas de temps.

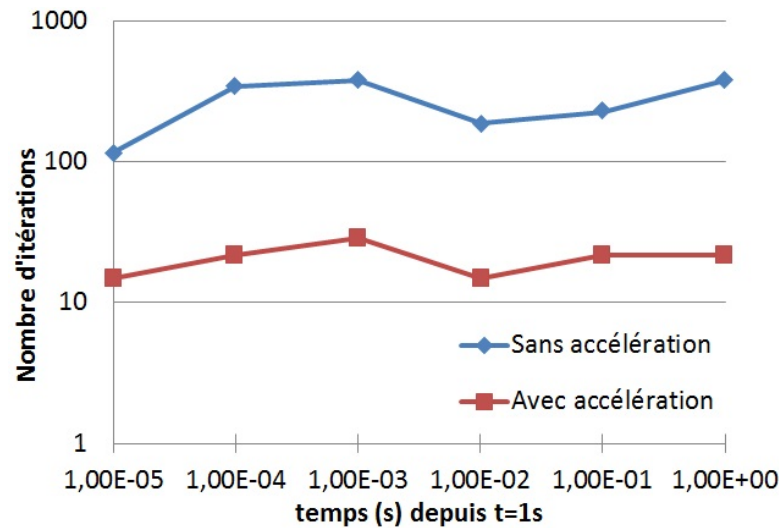


FIGURE 8.13 – Impact de la technique d'accélération sur le nombre d'itérations nécessaires pour converger chaque pas de temps d'un cas test, avec des petits pas de temps.

8.4 Application à une géométrie déformée : les essais de gerbage de Phénix

Jusqu'ici nous n'avons utilisé les solveurs développés dans CAST3M que sur des géométries invariantes et régulières. Dans l'objectif de démontrer l'efficacité de ces outils pour des calculs neutroniques sur des géométries déformées, nous présentons, dans cette section, leur application aux essais de gerbage de Phénix, qui sont présentés section 6.4. Les résultats obtenus par APOLLO3® sur ces mêmes essais, déjà présentés section 7.3, servent de référence.

Nous utilisons les mêmes sections efficaces macroscopiques représentatives de l'état du cœur de Phénix lors de ces essais qu'APOLLO3® (voir section 6.2). Tous les calculs présentés ici sont en 3D.

8.4.1 Description de la géométrie et des déplacements dans CAST3M

Nous avons d'abord envisagé une description de la géométrie similaire à celle utilisée dans APOLLO3®, c'est à dire séparant l'assemblage de l'inter-assemblage (voir par exemple figure 7.1). Le type de maillage alors considéré est illustré figure 8.14. Ce maillage est ensuite extrudé axialement pour passer en 3D.

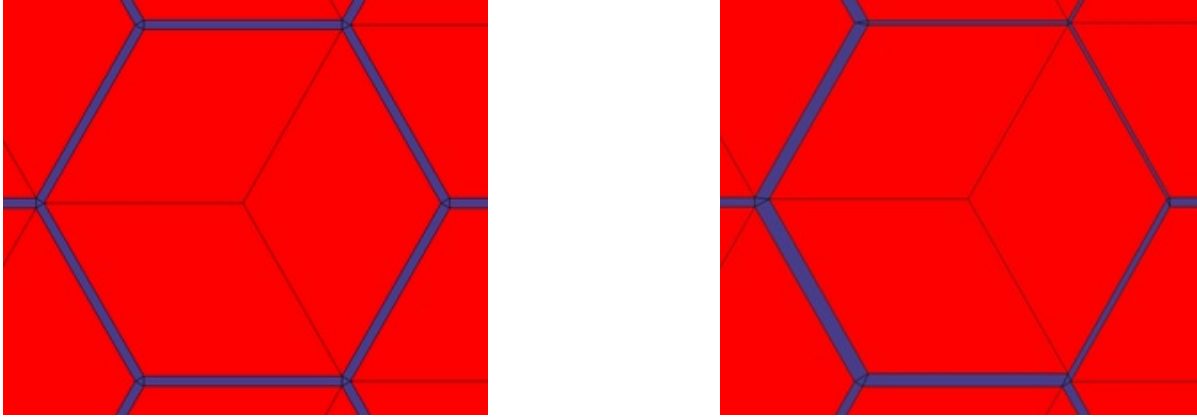


FIGURE 8.14 – Maillage de l’assemblage et de l’inter-assemblage dans CAST3M, configurations nominale (à gauche) et déformée (à droite).

Cette description a cependant quelques inconvénients. Tout d’abord, le mélange de mailles de différentes tailles, et la présence de mailles allongées ou très déformées, risque de causer des erreurs numériques. En outre, les mailles triangulaires de l’inter-assemblage (en violet figure 8.14) peuvent se retourner pour des déformations importantes du réseau. Le calcul est alors impossible. Enfin, contrairement à la géométrie pixellisée par APOLLO3® (voir figure 7.2), la déformation de maillage utilisée dans CAST3M, et détaillée un peu plus bas, conduit à des déformations telles qu’illustrées figure 8.15 (translation des nœuds dans des plans horizontaux). Ce type de déformation conserve le volume des assemblages (et donc nativement les quantités de matières fissiles) mais pas la surface d’échange entre l’assemblage et l’inter-assemblage. Une augmentation de cette surface conduit à une augmentation de la modulation par le sodium inter-assemblage et donc à une diminution artificielle de la réactivité.

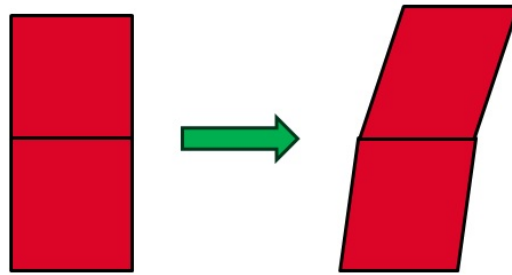


FIGURE 8.15 – Schéma de la déformation axiale de la géométrie utilisée dans CAST3M.

Pour toutes ces raisons, nous avons préféré nous orienter vers une description homogène de l’assemblage, incorporant le sodium inter-assemblage. Cette homogénéisation est neutroniquement correcte, et est cohérente avec l’auto-protection qui est faite pour un calcul homogène. Elle pose cependant la question de la gestion des déplacements et de la conservation des bilans matières.

Le maillage est similaire à celui de la figure 8.14, si ce n’est que l’inter-assemblage, en violet, est intégré aux mailles de l’assemblage. Lorsque la géométrie est déformée, chaque nœud du maillage se déplace du déplacement moyen des assemblages avec lesquels il est en contact (les

déplacements n'ont pas de composante axiale). Ainsi, les nœuds aux centres des assemblages se déplacent comme les assemblages, et les nœuds aux interfaces restent au centre de gravité du triangle formé par les nœuds des centres des assemblages adjacents. Ceci est visible figure 8.16, où les trois assemblages du coin supérieur droit se rapprochent (exagérément).

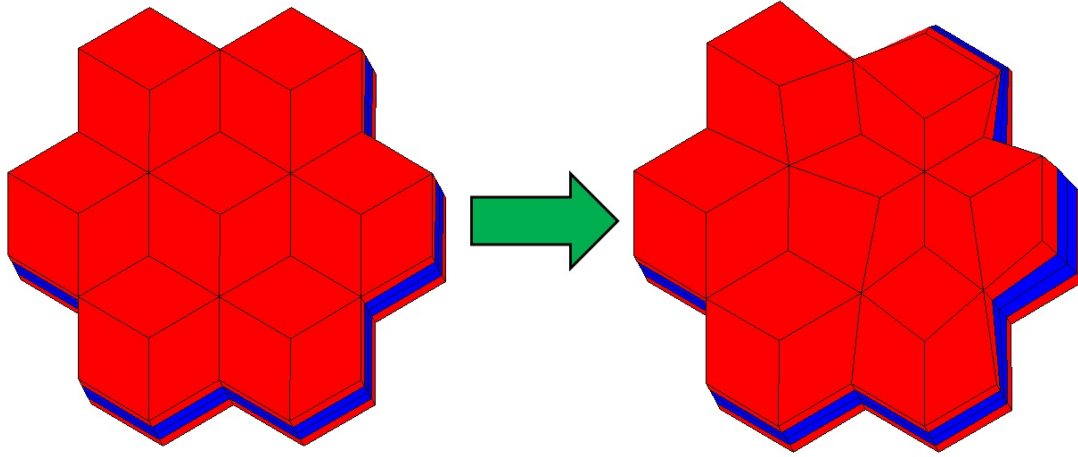


FIGURE 8.16 – Illustration à 7 assemblages de la déformation du maillage homogène de CAST3M. Les trois assemblages du coin supérieur droit se rapprochent.

Cette façon de déformer le maillage ne conserve pas le volume. Si on ne modifie pas les sections efficaces macroscopiques (qui sont le produit des sections microscopiques et des concentrations, voir équation (1.2)), cela revient à modifier les bilans matières. Pour corriger cet effet, on utilise des sections efficaces paramétrées par l'inverse de la surface des assemblages à côte donnée. On choisit ce paramètre car, au premier ordre, l'apport des isotopes des assemblages aux sections efficaces varie comme l'inverse du volume. Ainsi, grâce à ce choix de paramètre, l'interpolation linéaire est la plus juste possible (mais ce n'est pas vrai pour l'apport de l'inter-assemblage et les coefficients de diffusion). Notons que les calculs d'autoprotection sont les mêmes que ceux qui ont été faits pour les besoins de la méthode de pixellisation dans APOLLO3® (voir la présentation de la méthode section 7.1.1). On modifie seulement la valeur du paramètre qui leur est associée, et la façon dont on en déduit les sections macroscopiques. Plutôt que de fixer la valeur du paramètre pour les concentrations (voir équation (7.1)), on utilise la même valeur pour les concentrations et les sections microscopiques, ce qui est bien plus classique ($\sigma_{macro\ m}^{(p)}$ est une section macroscopique du matériau m au point de paramétrage p , $C_i^{(p)}$ est la concentration de l'isotope i pour la même valeur de p et $\sigma_i^{(p)}$ est la section microscopique du même isotope, pour la même valeur de p) :

$$\sigma_{macro\ m}^{(p)} = \sum_{i(sotopes)} C_i^{(p)} \sigma_i^{(p)}. \quad (8.21)$$

De la même façon, les concentrations des précurseurs doivent être corrigées lorsque les volumes des mailles changent, ou cela reviendrait à faire varier leur nombre. Pour cela, on corrige les concentrations par le rapport des volumes des mailles de la géométrie du pas de temps précédent et de la nouvelle. Cette façon de faire suppose que chaque maille contient toujours la même quantité de précurseurs.

8.4.2 Réflexion sur le traitement du flux en géométrie mobile lors de calculs cinétiques

Si on ne fait rien, lorsque les mailles se déplacent, les valeurs des champs du flux restent attachées aux mailles et le flux se déplace donc avec la matière. Physiquement, les neutrons ne sont pas attachés à la matière et n'ont donc pas de raison d'être entraînés par elle. On a donc envisagé, lorsque la géométrie est mise à jour, de projeter le flux du pas de temps précédent, porté par le maillage de la géométrie précédente, sur le nouveau maillage de calcul.

Il n'est cependant pas du tout évident que faire cette projection soit plus juste que de laisser le flux être entraîné par la déformation du maillage. L'hypothèse de la diffusion suppose une forte interaction du flux avec la matière. Supposer que le déplacement de la matière n'entraîne pas le flux est donc quelque part un peu contradictoire avec elle. De plus, même quand on lève cette hypothèse, il semble absurde de chercher des effets liés à un rattrapage des neutrons par la matière, celle-ci étant supposée par ailleurs beaucoup plus lente (et les transitoires que l'on considère dans cette thèse ne nécessitent pas de remettre en question cette hypothèse). Rappelons en effet que les équations que l'on écrit supposent toujours de manière sous-entendu que les neutrons se déplacent beaucoup plus vite que les noyaux (voir section 6.3.9).

La projection du flux est testée section 8.4.4. La conclusion est que son impact est négligeable sur les transitoires que l'on considère. Par commodité, elle ne sera pas faite par la suite.

Notons qu'avec la technique de pixellisation, le déplacement de la matière n'entraîne pas le flux neutronique. La question n'était donc pas apparue.

8.4.3 Gerbage statique

Nous ne reproduisons pas ici l'analyse déjà menée avec APOLLO3® section 7.3.2. Nous reproduisons seulement le calcul de gerbage central qui a servi à valider la méthode de pixellisation, en permettant une comparaison avec TRIPOLI-4 section 7.1.2. Les jeux inter-assemblages sont initialement comblés. La figure 8.17 donne les résultats obtenus par CAST3M sur ce cas. Ceux de TRIPOLI-4 et d'APOLLO3® sont les mêmes que figure 7.6. Pour information, on a également donné les résultats obtenus par CAST3M avec un maillage dit hétérogène, du type illustré figure 8.14. Les résultats de CAST3M (homogène) sont très proches à la fois de ceux de TRIPOLI-4 et de ceux d'APOLLO3®. En revanche, seuls deux points sur quatre ont pu être calculés avec le maillage hétérogène, car au-delà les déformations sont trop fortes et provoquent des erreurs de maillage (inversion de certaines mailles). On voit également que, avec le maillage hétérogène, CAST3M surestime l'effet en réactivité, probablement à cause de l'augmentation artificielle de la surface d'échange entre les assemblages et l'inter-assemblage, comme annoncé section 8.4.1.

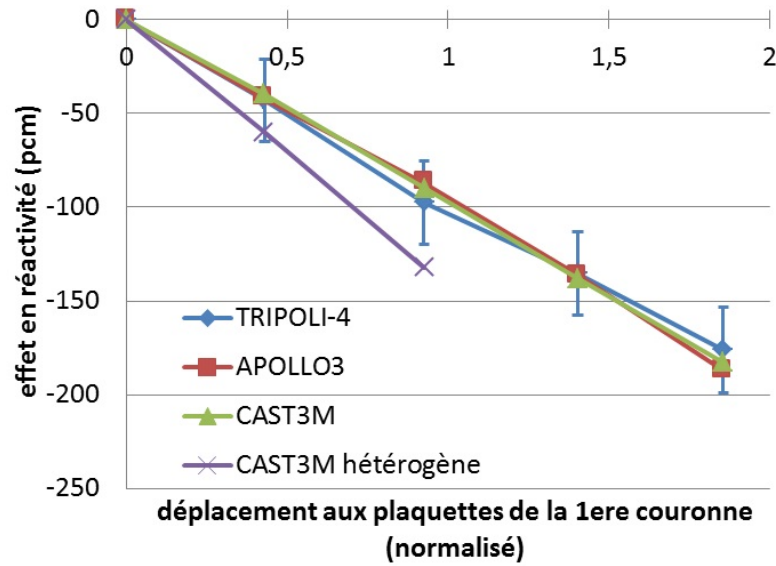


FIGURE 8.17 – Comparaison d’effets en réactivité obtenus par TRIPOLI-4, CAST3M et APOLLO3® sur un gerbage central de Phénix.

Ces résultats démontrent que l’approche à maillage mobile mise en place dans CAST3M, avec homogénéisation des assemblages et de l’inter-assemblage, est valide et permet bien de mener des calculs neutroniques sur des cœurs déformés. Chaque calcul CAST3M a pris environ 45min sur un processeur, contre environ 30min pour ceux d’APOLLO3® et 48h sur 256 processeurs pour TRIPOLI-4. Si les temps de calculs de CAST3M sont, cette fois, aussi proches de ceux d’APOLLO3®, c’est que la technique de pixellisation d’APOLLO3®, contrairement à celle de maillage mobile de CAST3M, impose une augmentation importante du nombre de mailles.

Des comparaisons entre des effets en réactivité obtenus sur d’autres types de déformations par TRIPOLI-4, APOLLO3® et CAST3M peuvent être trouvées dans l’annexe B.

8.4.4 Gerbage dynamique

Nous avons également calculé avec CAST3M (et homogénéisation du sodium inter-assemblage) le transitoire inspiré des essais de gerbage dynamique, mis en place pour tester la méthode de pixellisation section 7.3.3. Les déformations du cœur sont issues des mêmes calculs mécaniques, déjà présentés. Les données nucléaires utilisées sont également les mêmes (ce sont celles représentatives de l’état du cœur au moment des essais, voir section 6.2). Les pas de temps utilisés sont eux aussi identiques, 0.05s. Les différences portent sur les maillages, la représentation des déplacements, et les méthodes numériques utilisées. Les schémas numériques en temps notamment sont différents.

Les résultats sont donnés figure 8.18. Le calcul APOLLO3® est le même que celui figure 7.20. Il y a deux calculs CAST3M, de manière à tester l’impact de la projection du flux (voir section 8.4.2).

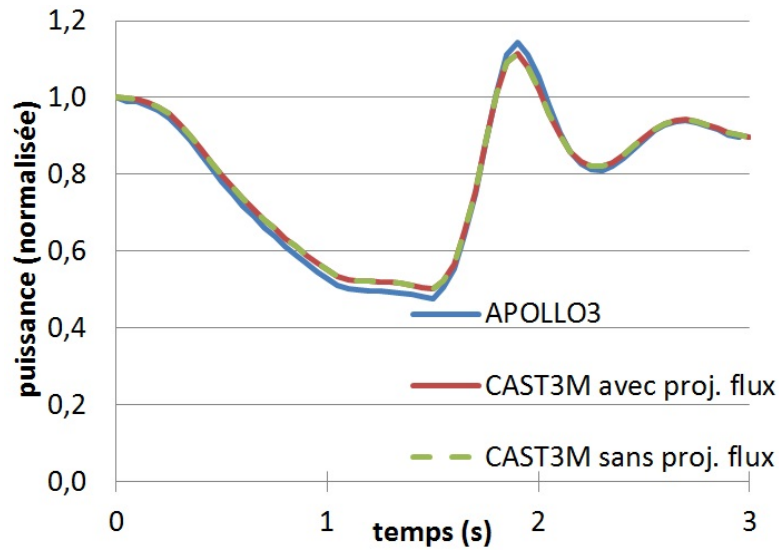


FIGURE 8.18 – Comparaison des évolutions de puissance obtenues par APOLLO3® et CAST3M lors d'un transitoire semblable à un gerbage dynamique.

Les calculs CAST3M apparaissent superposés, ce qui montre que la projection de flux a un impact négligeable sur ce cas d'application. On constate également que les résultats obtenus par les deux codes sont très proches. Cela ne prouve pas l'absence d'erreur commune aux deux approches présentées dans cette partie de thèse, néanmoins, étant données les différences entre ces deux approches, cette comparaison semble indiquer qu'elles sont toutes deux valides.

Conclusion de la deuxième partie

Deux méthodes de chaînage mécanique-neutronique ont été développées et présentées dans cette partie du manuscrit. Elles appartiennent chacune à une des deux grandes approches possibles pour traiter, dans les codes neutroniques déterministes, de déformations géométriques non triviales et de grandes ampleurs.

La première, particulièrement adaptée aux réacteurs à neutrons rapides, réacteurs pour lesquelles ces méthodes sont développées, consiste à utiliser un maillage de calcul fixe et à y projeter la géométrie déformée. Dans la deuxième approche au contraire, le maillage de calcul se déforme avec le cœur.

Ces deux méthodes ont été évaluées séparément, puis confrontées sur les essais de gerbage de Phénix. Que cela soit en stationnaire ou en transitoire, les résultats obtenus sont satisfaisants et cohérents. Cette comparaison entre des méthodes très différentes, que cela soit pour la représentation de la géométrie déformée, les maillages de calculs ou les techniques de résolution numérique donne confiance en ces outils, à défaut de les valider rigoureusement. C'est notamment la seule comparaison dont on dispose en cinétique, ce qui la rend indispensable.

Avant d'aller plus loin, disons un mot sur la représentation de la géométrie déformée. Cette question ne semblait pas centrale a priori, mais s'est finalement révélée receler de difficultés et de pièges insoupçonnés. Nous avons vu figures 7.2 et 8.15 les représentations axiales des déformations utilisées dans APOLLO3® et CAST3M. Les calculs TRIPOLI-4 présentés figures 7.6 et 8.17 en utilise encore une troisième. Dans celle-ci les prismes droits hexagonaux de départ sont translatés puis inclinés. Les trois processus sont résumés figure 9.1 ci-dessous. Chaque méthode a un inconvénient. Dans la représentation de TRIPOLI-4, il est nécessaire de "corriger" la géométrie à l'interface des prismes pour éviter d'avoir une zone avec des concentrations doublées et une zone vide. Le type de déformation utilisé dans CAST3M augmente la surface d'échange des assemblages ce qui conduit à un biais important lorsque le sodium inter-assemblage n'est pas homogénéisé dans l'assemblage. Enfin, la représentation utilisée dans APOLLO3® crée des interfaces horizontales fictives entre les assemblages et le milieu inter-assemblage, ce qui conduit à un biais lorsque les pixels sont suffisamment fins pour décrire cette zone. L'importance des erreurs commises en traitant mal cette question peut paraître d'autant plus surprenante que l'on parle ici de méthodes pour représenter l'inclinaison des assemblages, inclinaison dont on a montré au paragraphe c. de la section 7.1.3 qu'elle a un

impact négligeable. Ainsi le mauvais traitement d'un effet négligeable conduit ici à une erreur non négligeable. C'est le risque d'augmentation artificielle des surfaces d'échange qui dans notre cas conduit à ces erreurs, alors que les effets physiques sont attendus sur le déplacement de la matière elle-même. On manque néanmoins de référence absolument sûre sur cette question, même si la déformation utilisée dans TRIPOLI-4 est une assez bonne représentation de la déformation réelle des assemblages. Elle a notamment l'avantage de conserver la longueur réelle des assemblages.

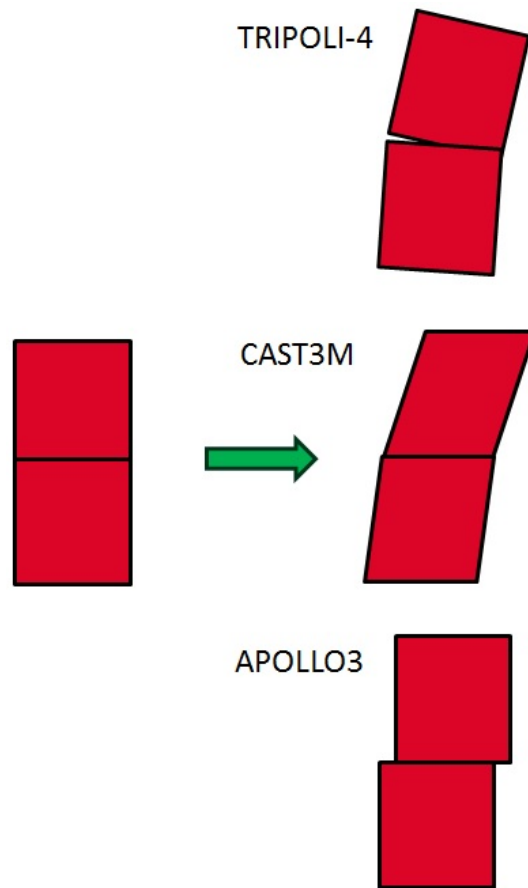


FIGURE 9.1 – Schéma de la déformation axiale de la géométrie utilisée dans TRIPOLI-4, CAST3M et APOLLO3®.

Dans la suite de la thèse, on a utilisé l'outil développé dans CAST3M pour la mise en place d'un véritable couplage entre neutronique et thermomécanique.

Troisième partie

Etude de techniques de couplage sur l'expérience Godiva

Table des matières

Chapitre 10 Introduction de la troisième partie	141
10.1 Présentation de l'expérience Godiva	141
10.2 Résultats obtenus à PSI	143
Chapitre 11 Calculs monophysiques	145
11.1 Neutronique : transport PN simplifié et simulé en cinétique	145
11.1.1 Nécessité d'améliorer le modèle neutronique	145
11.1.2 Les équations SPN	145
11.1.3 Evaluation	146
11.2 Neutronique : la factorisation quasi-statique	153
11.2.1 Principe et intérêt de la factorisation	153
11.2.2 Forme générale de la cinétique	153
11.2.3 Les équations quasi-statiques complètes	155
11.2.4 Les deux approches (IQM et PCQM) pour la résolution du système quasi-statique	156
11.2.5 Résolution numérique du système quasi-statique	157
11.2.6 Simplifications du système d'équation quasi-statique	159
11.2.7 Evaluation du solveur de cinétique point sur Godiva	160
11.3 Thermique	161
11.4 Mécanique	162
Chapitre 12 Calculs couplés	165
12.1 Etablissement d'une référence	165
12.1.1 Avec une neutronique cinétique spatiale "complète"	165
12.1.2 Avec la factorisation quasi-statique	168
12.2 Travail sur les méthodes de couplage	172
12.2.1 Pas de temps fixe	172
12.2.2 Pas de temps variable	176
Chapitre 13 En guise de perspective : réalisation d'un couplage intriqué	179
13.1 Etablissement des équations	179
13.1.1 Modèles couplés	179
13.1.2 Algorithme du point fixe	181

13.1.3	Algorithme de Newton	183
13.2	Expérience numérique	188
13.2.1	Cas considéré	188
13.2.2	Résultats	191
13.3	Conclusion	194
Chapitre 14	Conclusion de la troisième partie	197

Introduction de la troisième partie

A l'issu du travail présenté à la partie précédente, nous sommes capables de chaîner des simulations mécaniques et neutroniques. Nous nous proposons, dans cette partie de thèse, de passer au couplage et d'en étudier les techniques. Nous avons mené cette étude dans CAST3M qui offre, maintenant que la diffusion neutronique y a été implémentée, le meilleur environnement multiphysique à notre disposition.

Nous avons choisi un cas d'application à la fois simple, réel et qui met en jeu un couplage fort pour cette étude des techniques de couplage : l'expérience Godiva. Elle est présentée plus bas.

L'accent est mis dans cette partie de thèse sur les techniques de couplage séquentielles, entre solveurs. Dans cette optique, le chapitre 11 présente la modélisation retenue pour chacune des physiques couplées et le chapitre 12 le couplage. Néanmoins, le chapitre 13 présente une première mise en oeuvre, sur une représentation très simplifiée de Godiva, d'un couplage intriqué, c'est à dire avec un solveur multidisciplinaire. Cette partie de la thèse est finalement conclue par le chapitre 14.

10.1 Présentation de l'expérience Godiva

Godiva est une expérience américaine des années 50, dont l'objet est l'étude du comportement neutronique d'un système surcritique. Les informations données ici sont extraites du compte rendu de l'expérience [133] et du travail d'une équipe de PSI, en Suisse, qui, comme nous le faisons ici, a utilisé Godiva pour mettre en avant ses outils de couplage [36]. Le dispositif considéré est une sphère d'uranium métallique très enrichie en uranium 235. Ses propriétés sont données dans le tableau 10.1.

Une photo de l'expérience est donnée figure 10.1. On voit que la sphère est en trois morceaux, pour limiter le risque de criticité pendant les phases de manutention. La réactivité peut être ajustée en ajoutant des pastilles d'uranium à sa surface. Enfin, quand la sphère est formée, il est encore nécessaire d'insérer un barreau d'uranium en son centre pour atteindre la criticité. Dans les calculs présentés dans cette partie, Godiva est toujours modélisée comme une sphère parfaite. Nous ne prenons donc pas en compte le fait qu'elle est constituée de pièces juxtaposées.

Rayon	8.7407cm
Enrichissement en U5	93.5%
Densité	18740kg.m ⁻³
Module d'Young	208GPa
Coefficient de Poisson	0.23
Coefficient de dilatation thermique	1.39.10 ⁻⁵ K ⁻¹
Conductivité	27.5W.m ⁻¹ .K ⁻¹
Capacité thermique spécifique	117.7J.kg ⁻¹ .K ⁻¹

TABLEAU 10.1 – Paramètres principaux de l'expérience Godiva.

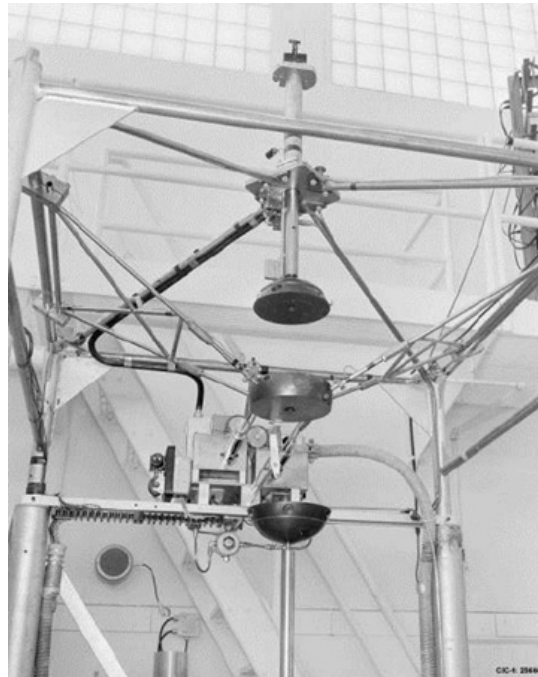


FIGURE 10.1 – Une photo de l'expérience Godiva, en position ouverte.

Godiva a servi à l'observation d'excursions de puissance. La sphère est rendue surcritique soudainement, ce qui provoque un dégagement de puissance, une élévation de température et une dilatation de la sphère, laquelle étouffe la réaction en chaîne. Ce couplage entre neutronique, thermique et mécanique est résumé figure 10.2. On remarque qu'il n'y a pas d'influence directe de la thermique sur la neutronique : l'effet Doppler est inexistant, à cause du spectre neutronique extrêmement dur. On le vérifiera par la suite.

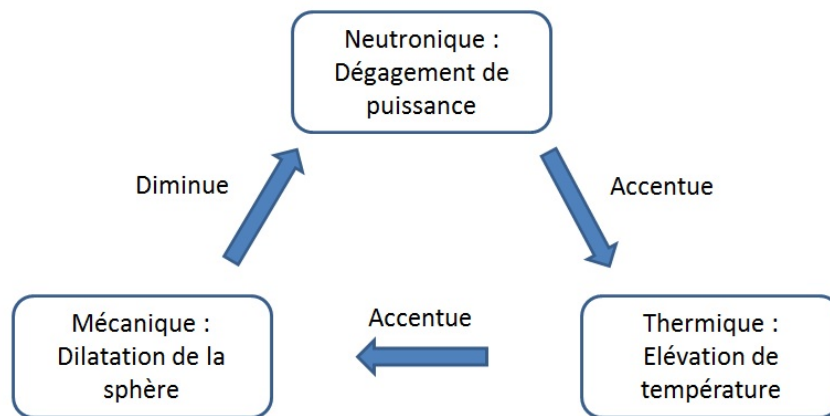


FIGURE 10.2 – Les disciplines intervenants et leurs interactions.

La sphère pouvant être considérée adiabatique, l'énergie s'y accumule et elle se dilate jusqu'à ce que la sphère ne soit plus surcritique prompte (mais elle reste surcritique à l'échelle de temps que l'on considère dans la suite). La puissance décrit donc un pic qui fournit l'énergie thermique nécessaire à la dilatation de la sphère, puis se stabilise à une valeur suffisamment faible pour avoir un impact négligeable sur la thermique à l'échelle de temps considéré, et en équilibre neutronique avec les précurseurs produits précédemment. Le transitoire étant très rapide, peu de précurseurs ont été produits, et la puissance se stabilise donc plusieurs ordres de grandeur sous la puissance maximale obtenue. A une échelle de temps plus grande, la réactivité restant positive, on verrait la puissance croître à nouveau, mais avec une constante de temps liée aux neutrons retardés (la dizaine de secondes). La rapidité du phénomène nécessite la prise en compte des effets dynamiques en mécanique, qui conduisent à de petites oscillations de la taille de la sphère.

On s'intéresse en particulier au plus violent des pics mesurés, dont on résume les caractéristiques tableau 10.2.

"Période" (temps de multiplication par e de la puissance en l'absence de contre-réaction)	$11.6\mu s$
Excès en réactivité initial	$\approx 1.082\%$
Puissance maximale	3.10^{20} fissions/s soit $\approx 8.6\text{GW}$

TABLEAU 10.2 – Les caractéristique de l'excursion de puissance la plus violente réalisée.

10.2 Résultats obtenus à PSI

Nous présentons ici les résultats de l'équipe de C. Fiorina, de PSI, publiés en 2014 [36] (notons qu'il existe une référence plus récente [6] du même groupe, où la neutronique est pris en charge, en cinétique, par le code Monte-Carlo Serpent [70]). Dans une approche similaire à celle mise en œuvre dans cette thèse, ils ont développé des solveurs neutroniques (transport SN 3D), thermomécanique et thermohydraulique dans un environnement commun : OpenFOAM.

Godiva a été utilisée pour mettre en avant cet outil de calcul multiphysique. En particulier, ils ont calculé l'excursion de puissance la plus violente réalisée et déjà présentée (voir tableau 10.2).

Leurs résultats sont donnés figure 10.3. En particulier, ils obtiennent un pic de puissance de 5.23GW, une élévation maximale de la température moyenne de 38K et une variation de volume finale de 0.125%. Une mesure de la vitesse de croissance initiale de la puissance donne un temps caractéristique proche de celui de l'expérience : $11.7\mu s$. Ces calculs sont réalisés par des solveurs 3D best estimate avec un maillage fin ($\approx 5.10^5$ mailles), et sont donc lourds : une semaine sur 16 processeurs. Au niveau de l'algorithmique de couplage, un point fixe "amélioré" est utilisé : la thermomécanique est mise à jour avant que la neutronique n'ait fini de converger. Nous serons amenés à nous comparer à ces résultats qui peuvent être considérés comme une référence.

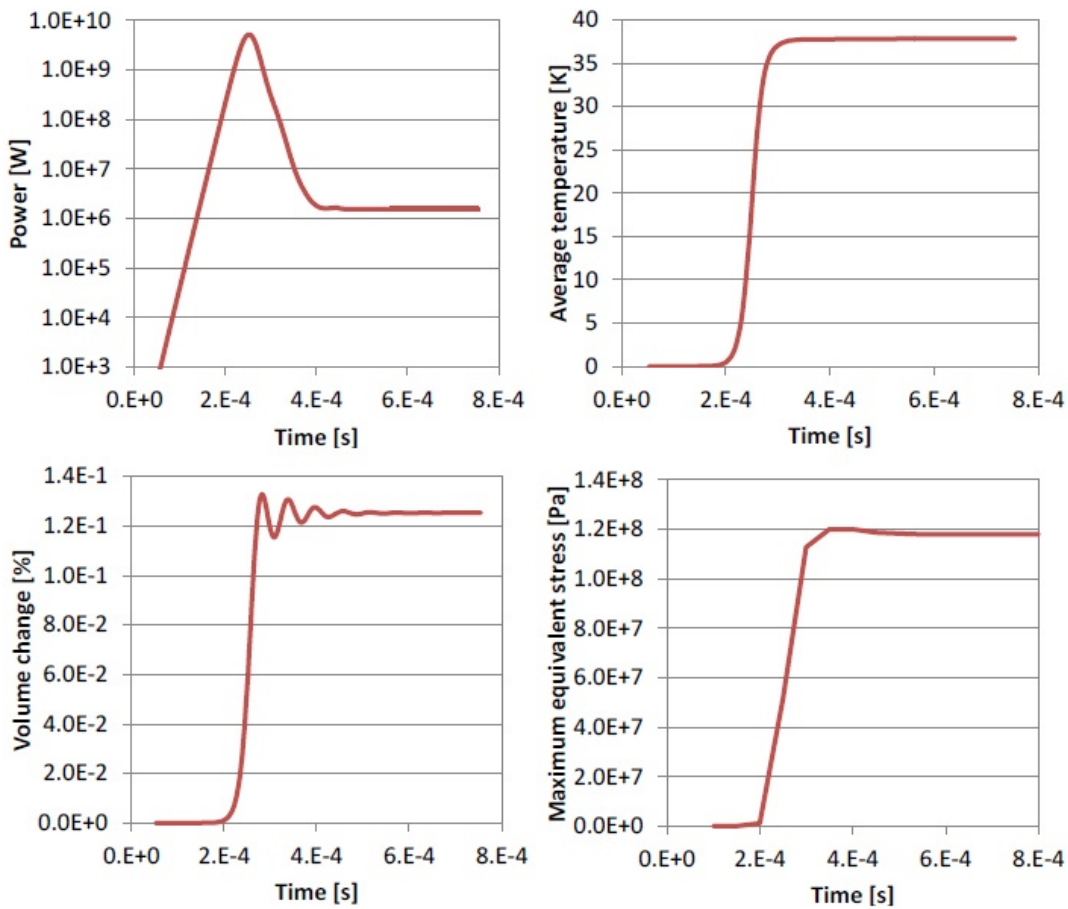


FIGURE 10.3 – Résultats obtenus à PSI sur l'excursion de puissance de période $11.6\mu s$ de Godiva.

Calculs monophysiques

Ce chapitre présente les modèles couplés pour la simulation de l'expérience Godiva. La section 11.1 introduit les équations SPN utilisées en neutronique. Toujours pour la neutronique, la section 11.2 présente la factorisation quasi-statique qui est utilisée pour améliorer le couplage. Enfin, les sections 11.3 et 11.4 détaillent respectivement les modélisations, standards, impliquées en thermique et en mécanique.

11.1 Neutronique : transport PN simplifié et simulé en cinétique

11.1.1 Nécessité d'améliorer le modèle neutronique

Les équations de la diffusion neutronique ne sont pas valables lorsque le flux neutronique interagit peu avec la matière. C'est malheureusement le cas de l'expérience Godiva dont la taille est du même ordre que le libre parcours moyen des neutrons. Le phénomène dominant est donc le transport. On l'a vérifié en calculant le coefficient multiplicateur (K_{eff}) de Godiva avec notre solveur de diffusion : on obtient 0.65, soit un résultat très éloigné de la réalité (la sphère devrait être juste critique, soit un K_{eff} de 1).

Pour pouvoir traiter cette expérience avec un coût de développement raisonnable, nous avons implémenté dans CAST3M une méthode de résolution de transport PN simplifié simulé par diffusions. Le principal avantage de cette modélisation est que l'on peut réutiliser le solveur de diffusion déjà développé. Pour ce travail, nous nous sommes basés sur [9] qui expose bien la méthode. La présentation que nous en faisons ici détaille un peu plus les calculs. Nous généralisons également la méthode en introduisant la cinétique. Enfin, nous simplifions les conditions aux limites en considérant le vide et la réflexion totale plutôt qu'un albédo isotrope.

11.1.2 Les équations SPN

Pour ne pas alourdir le corps du document, nous donnons ici, sans démonstration, la forme des équations SPN simulées. Plus de détails à leur propos peuvent être trouvés dans deux annexes :

- L'annexe C détaille leur établissement et la définition des paramètres et variables y intervenant.
- L'annexe D s'intéresse en particulier au cas sphérique, qui est celui de Godiva. On montre les défauts du modèle SPN sur cette géométrie, et on construit un système d'équations PN non simplifiées, qui tire parti des symétries de la sphère. Ces équations n'ont cependant pas pu être résolues numériquement.

L'équation de transport peut être mise sous la forme suivante, au prix d'hypothèses listées section C.8. Les notations sont similaires à celles adoptées pour l'équation (8.9), à l'exception du terme $S_{supl.}^{(g,i)}$ qui dénote une source supplémentaire. La variable $\tilde{\phi}_0^{(g,i)}$ est construite comme combinaison linéaire des composantes paires de la décomposition sur les polynômes de Legendre du flux du groupe g .

$$\begin{aligned} \frac{1}{V(g,i)} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\phi}_0^{(g,i)} - \vec{\nabla} D^{(g,i)} \vec{\nabla} \tilde{\phi}_0^{(g,i)} + \sigma_{disp}^{(g,i)} \tilde{\phi}_0^{(g,i)} = \\ \sum_{(g',j) \neq (g,i)} \sigma_{s0}^{(g',j) \rightarrow (g,i)} \tilde{\phi}_0^{(g',j)} + (1 - \beta) \chi_p^{(g,i)} \sum_{(g',j)} \nu \sigma_f^{(g,i)} \tilde{\phi}_0^{(g',j)} + \sum_l \chi_l^{(g,i)} \lambda_l C^l + S_{supl.}^{(g,i)}. \end{aligned} \quad (11.1)$$

On retrouve ainsi un système d'équations de diffusion qui peuvent être résolues par notre solveur. Le nombre d'équations est multiplié par un facteur donné, 2 ou 3 dans nos applications, par rapport au modèle de diffusion classique.

La condition aux limites de vide s'écrit dans ce formalisme comme une relation matricielle entre flux et courant du même groupe d'énergie g :

$$CL_{vide} : \vec{\nabla} \tilde{\phi}_0^{(g,i)} \cdot \vec{n} = \sum_j A_{i,j} \tilde{\phi}_0^{(g,j)}, \text{ à la frontière.} \quad (11.2)$$

La condition de réflexion s'écrit quant à elle ainsi :

$$CL_{refl.} : \vec{\nabla} \tilde{\phi}_0^{(g,i)} = \vec{0}, \text{ à la frontière.} \quad (11.3)$$

11.1.3 Evaluation

Le SPN simulé par diffusion (11.1) a été implémenté dans CAST3M. Rappelons qu'il s'agit simplement de détourner le solveur de diffusion neutronique qui a été développé et validé par ailleurs. On l'utilise avec une seule dimension d'espace.

Pour vérifier que le SPN a été développé sans erreur et se comporte correctement, nous l'avons confronté à APOLLO2 [107] et à APOLLO3®. Nous présentons d'abord une comparaison sur une géométrie plane, où il n'introduit pas d'approximation géométrique, contrairement au cas sphérique de Godiva (voir annexe D).

a. Application à un problème plan

Dans le cas d'un problème plan (infini) les hypothèses du SPN (C.10) et (C.11) sont vérifiées exactement. C'est donc un moyen d'estimer les autres sources d'erreur. Nous avons considéré

un problème de composition et de taille caractéristique similaires à celles de Godiva : même composition et épaisseur du plan égale au rayon de l'expérience (voir tableau 10.1).

Nous utilisons comme référence un calcul APOLLO2 SN à 64 directions et 600 groupes d'énergie sur une géométrie 1D plan discrétisé en 80 mailles. L'anisotropie des transferts peut être traitée jusqu'à l'ordre 5 (voir (C.9)). Ce calcul sert également à la production des sections efficaces pour CAST3M : une homogénéisation en espace et une condensation sur 33 groupes (il s'agit du maillage énergétique classique de RNR-Na) lui est demandé. Ce maillage à 33 groupes n'est cependant pas adapté à notre cas pour plusieurs raisons :

- Le SPN démultiplie le nombre de groupes effectifs, et la résolution, à cause des transferts, a une complexité quadratique en le nombre de groupes. Le réduire peut donc permettre des gains considérables en temps de calcul.
- Les neutrons sont très peu ralentis sur ce système. Les groupes thermiques sont ainsi quasiment vides. En plus d'être inutiles, ces groupes vides gênent l'utilisation de l'accélération par rebalancing.
- Enfin, il y a une limitation intrinsèque à CAST3M à 36 groupes d'énergie effectifs qui serait largement dépassée si on utilisait 33 groupes d'énergie (le nombre de groupes effectifs étant multiplié par 2 ou 3).

Une condensation supplémentaire, sur un maillage à 9 groupes est donc effectuée par un post-processeur. Elle est aussi exacte que possible, APOLLO2 donnant flux et taux de réaction. La correspondance entre les deux maillages énergétiques est donnée tableau 11.1. Ce maillage énergétique a été utilisé pour tous les calculs sur Godiva.

Maillage 9 groupes	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Maillage 33 groupes	1-3	4	5	6	7	8	9	10-12	13-33

TABLEAU 11.1 – Correspondance entre le maillage énergétique à 9 groupes utilisés par CAST3M et le maillage classique à 33 groupes. Les premiers groupes sont les plus énergétiques.

CAST3M utilise pour sa part, outre les 9 groupes d'énergie déjà cités, 50 mailles radiales (maillage vérifié comme largement suffisant) et des sections de transfert isotropes. En effet, le SPN simulé impose que les transferts impairs soient nuls, et il ne semble pas pertinent d'utiliser les termes pairs au-delà du premier tout en négligeant les termes impairs d'ordre inférieur.

Le même cas est également traité par le solveur Minos d'APOLLO3®. On l'utilise dans la même configuration que CAST3M, c'est à dire en SPN, avec 9 groupes d'énergie et 50 mailles. On utilise les mêmes sections efficaces que CAST3M.

Les trois codes utilisent une condition aux limites de vide d'un côté du plan. De l'autre côté, on impose soit une réflexion si on ne modélise que la moitié du plan, soit une autre condition de vide si on le modélise en entier. Ces deux cas ont été observés comme strictement équivalents pour les deux codes, ce qui montre la validité de la condition aux limites de réflexion.

Les résultats sont donnés tableau 11.2. Les sections efficaces des calculs CAST3M et APOLLO3® sont condensées à partir du calcul de référence, le calcul APOLLO2 avec transfert P5. L'utilisation du calcul APOLLO2 avec transfert P0 pour générer les sections efficaces a été testé et donne les mêmes résultats, à une dizaine de pcm près (résultats non donnés dans le

tableau 11.2). De manière générale, les effets d'autoprotection sont très faibles sur ce genre de système où les neutrons interagissent très peu avec la matière. Le spectre très dur et le peu de résonances de l'uranium 235 plaident également pour la quasi absence d'effets d'autoprotection.

Cas	K_{eff}	écart référence (pcm)
APOLLO2 transfert P5 (référence)	1.18171	0
APOLLO2 transfert P1	1.17280	-643
APOLLO2 transfert P0	1.25505	4945
CAST3M SP5	1.25400	4878
CAST3M SP3	1.25045	4652
APOLLO3® SP5	1.25402	4880
APOLLO3® SP3	1.25048	4654

TABLEAU 11.2 – Comparaison des coefficients multiplicateurs obtenus par CAST3M et APOLLO3® en SPN et par APOLLO2 en SN, sur un problème plan.

On déduit de cette comparaison que :

1. Les développements effectués dans CAST3M sont vérifiés corrects par la comparaison à APOLLO3® : on observe un écart de 2pcm, que cela soit en SP5 ou en SP3.
2. L'anisotropie des sections de transfert a un impact inhabituellement fort, de 5000pcm environ. Cela est dû à la petite taille du système étudié, associé à un spectre neutronique extrêmement dur. De ce fait, les neutrons interagissent très peu avec la matière et la probabilité du renvoi d'un neutron vers l'intérieur du plan par une collision impacte fortement le résultat.
3. Cet effet d'anisotropie est porté principalement par le transfert P1, qui est inaccessible au SPN simulé car impair.
4. Les calculs SP5 sont à 65pcm du calcul APOLLO2 équivalent (avec transfert isotrope). Cela prouve bien l'équivalence du SPN avec le SN sur ce cas d'application.
5. Le SP3 et le SP5 sont relativement proches (environ 220pcm).

Au vu du fort impact de l'anisotropie des sections de transfert, il a été essayé d'utiliser des sections P0 corrigées pour tenir compte d'une partie des effets P1 (voir par exemple [10] pour la théorie). La correction consiste à écrire (on note avec un exposant c les sections corrigées, et on rappelle que $\sigma_{sl}^{g \rightarrow g'}$ est la section efficace macroscopique de transfert d'ordre l de g vers g' (voir équation (C.9)) et que σ_t^g est la section efficace macroscopique totale) :

$$\sigma_{s0}^{g \rightarrow g \ c} = \sigma_{s0}^{g \rightarrow g} - \sum_{g'} \sigma_{s1}^{g \rightarrow g'}$$

$$\sigma_t^{g \ c} = \sigma_t^g - \sum_{g'} \sigma_{s1}^{g \rightarrow g'}$$

Les résultats obtenus par CAST3M et APOLLO3® avec ces sections corrigées sont donnés tableau 11.3

Cas	K_{eff}	écart référence (pcm)
APOLLO2 transfert P5 (référence)	1.18171	0
CAST3M SP5	1.18430	185
CAST3M SP3	1.17653	-373
APOLLO3® SP5	1.18432	186
APOLLO3® SP3	1.17654	-372

TABLEAU 11.3 – Comparaison des coefficients multiplicateurs obtenus par CAST3M et APOLLO3® en SPN et avec des sections efficaces P0 corrigées et par APOLLO2 en SN, sur un problème plan.

On constate que la correction des sections permet effectivement de rattraper l'essentiel de l'erreur sur le coefficient multiplicateur due à l'utilisation de sections efficaces d'ordre inférieur. Dans toute la suite nous utilisons ces sections efficaces corrigées.

b. Application à Godiva

Nous comparons ici les résultats obtenus par CAST3M en SPN sur Godiva à ceux d'APOLLO2. La description du système est donnée tableau 10.1. Les deux solveurs sont réglés comme précédemment. On utilise notamment une condition de vide à la frontière de la sphère. Les résultats sont donnés tableau 11.4. On s'attend bien sûr à trouver un K_{eff} proche de 1, c'est à dire un système critique comme observé par l'expérience. Comme précédemment, les calculs CAST3M sont tous alimentés par le calcul APOLLO2 de référence, et les sections efficaces P0 sont corrigées.

Cas	K_{eff}	écart référence (pcm)
APOLLO2 transfert P5 (référence)	0.99151	0
APOLLO2 transfert P1	0.98671	-491
APOLLO2 transfert P0	1.09901	9865
APOLLO2 transfert P5, Température de 70 ° C au lieu de 20 ° C	0.99151	0
CAST3M SP5	1.04614	5267
CAST3M SP3	1.03644	4372

TABLEAU 11.4 – Comparaison des coefficients multiplicateurs obtenus par CAST3M en SPN et par APOLLO2, sur Godiva.

L'anisotropie des sections de transfert, évaluée avec APOLLO2, pèse encore plus lourd sur ce cas que sur le problème plan : environ 10000pcm. On s'attend néanmoins à ce que l'utilisation de sections efficaces corrigées gomme l'essentiel de cet effet, comme sur le problème plan vu précédemment. Il semble donc y avoir quelques milliers de pcm d'écart dus aux approximations géométriques du SPN (voir annexe D).

L'effet de la température des matériaux (sans prise en compte de la dilatation thermique) est, quant à lui, trouvé complètement négligeable. Il ne sera pas nécessaire de prendre en compte l'effet Doppler. Encore une fois, cela est dû aux spécificités d'un système où les neutrons interagissent très peu avec la matière (sans compter le spectre très dur et l'utilisation d'uranium 235 qui présente peu de résonances) : l'autoprotection est inexistante.

Pour illustration, le flux neutronique du premier groupe d'énergie, décomposé sur les harmoniques paires, calculé par CAST3M en SP5 sur Godiva est donné figure 11.1. On a tracé les flux de la décomposition (C.15), différents des flux solveurs définis par (C.21). On voit bien les effets des conditions aux limites, au centre et en périphérie. La dernière harmonique tracée est proche de 0, ce qui explique qu'il sera possible de la négliger en utilisant seulement un calcul SP3. On remarque également que le flux n'est pas isotrope au centre de la sphère (les harmoniques $\neq 0$ devraient être nulles). Cela fait partie des approximations géométriques du SPN. Les équations PN complètes en coordonnées sphériques introduisent un terme en $\frac{1}{\text{rayon}}$ sur les harmoniques différentes de la première, ce qui force l'isotropie (D.3).

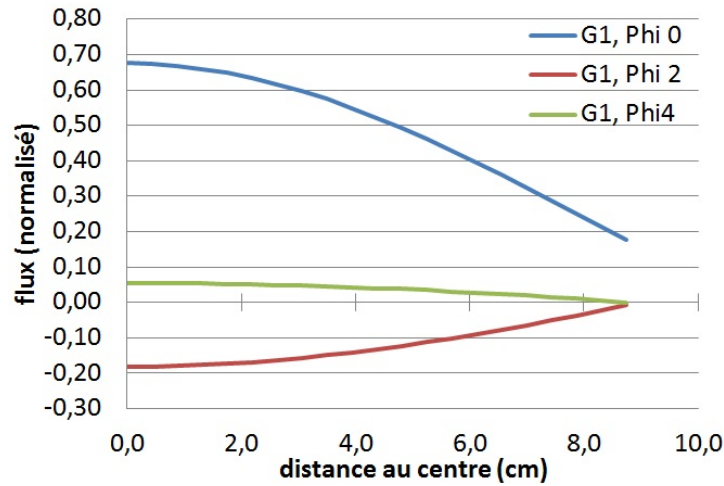


FIGURE 11.1 – Décomposition du flux du premier groupe sur les harmoniques pairs calculée par CAST3M en SP5.

Plus que l'état neutronique nominal, ce sont les effets différentiels qui vont nous intéresser. La figure 11.2 donne les effets en réactivité de dilatations uniformes calculés par CAST3M et APOLLO2. Les effets en réactivité de CAST3M ont été calculés après renormalisation de la matrice de fission pour ramener le K_{eff} à 1 (vu l'écart du K_{eff} à 1, l'impact de cette modification est assez important). SP5 et SP3 donnent des résultats similaires, tous deux assez éloignés de la référence. Il a été essayé d'utiliser, sur les états perturbés, des sections efficaces autoprotégées par APOLLO2 sur la géométrie dilatée : l'effet est complètement négligeable et est de l'ordre du pcm. Encore une fois, les effets d'autoprotection sont négligeables sur ce système. Il ne sera donc pas nécessaire de prendre en compte l'impact de la dilatation de la sphère sur les sections efficaces microscopiques à 9 groupes utilisées par CAST3M.

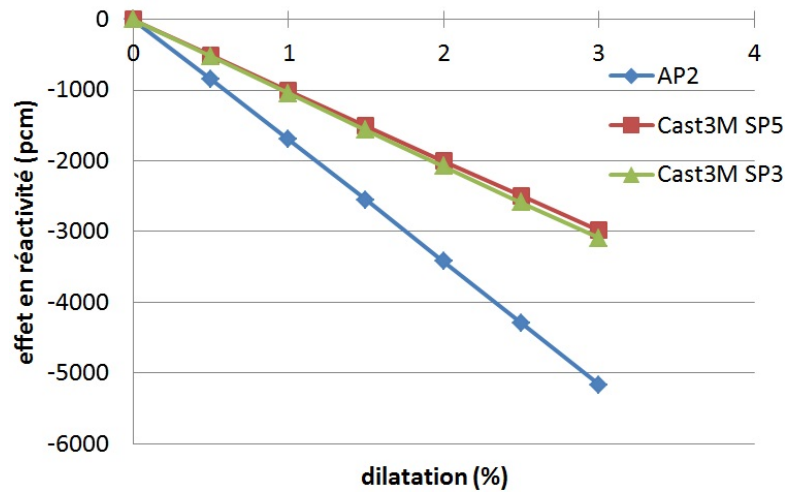


FIGURE 11.2 – Effets en réactivité d'une dilatation uniforme de Godiva.

Enfin, figures 11.3 et 11.4, on vérifie que le comportement cinétique du SPN est "sain", faute de pouvoir le comparer à une référence. Figure 11.3 on impose une dilatation uniforme instantanée de la sphère de 0.5% au premier pas de temps, puis on revient à la géométrie nominale 0.25s plus tard. Le transitoire est calculé avec des pas de temps de 0.05s. Figure 11.4 on impose la même dilatation au premier pas de temps, mais on suit l'évolution de la puissance avec des pas de temps de $2 \cdot 10^{-7}$ s. Le comportement observé sur les deux courbes semble physiquement correct. On voit figure 11.4 que l'ordre de grandeur de la vitesse de réaction neutronique du système est de 10^{-6} s, ce qui est très faible. Nous retrouverons cette très grande vitesse de réaction par la suite. Le SP3 donne des résultats proches du SP5, avec une baisse de puissance légèrement plus importante, ce qui est cohérent avec les calculs stationnaires figure 11.2.

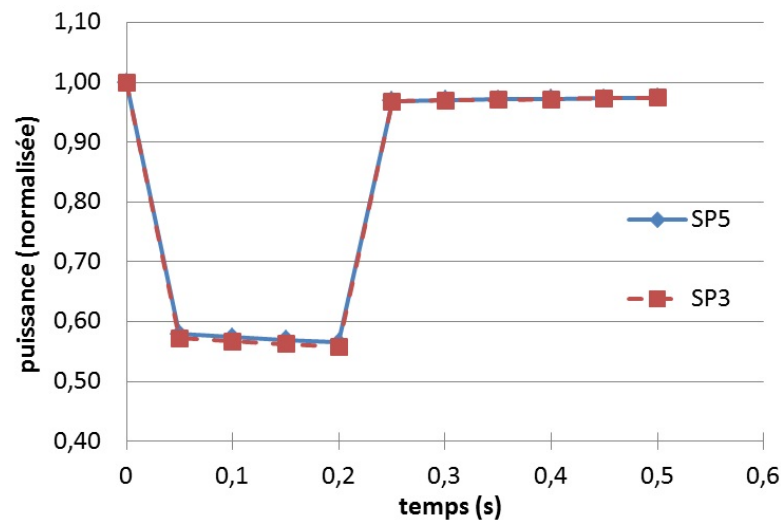


FIGURE 11.3 – Cinétique neutronique test sur Godiva avec grands pas de temps.

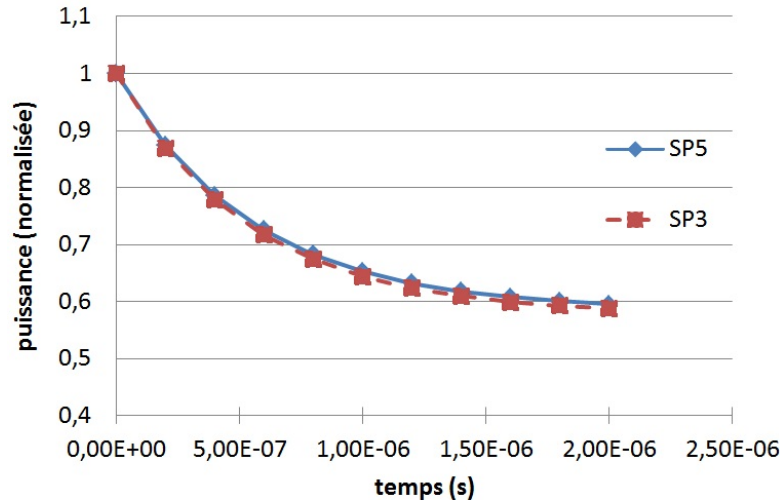


FIGURE 11.4 – Cinétique neutronique test sur Godiva avec grands pas de temps.

Une remarque s'impose sur la prise en compte de la déformation mécanique pendant un calcul cinétique (question déjà abordée section 8.4.2). Le flux n'étant pas attaché à la matière, on pourrait penser qu'il serait plus juste d'initialiser chaque pas de temps en projetant le flux du pas de temps précédent sur le maillage déformé. Cependant, pour Godiva, cela revient à supposer par exemple que la sphère, en se dilatant, est capable de rattraper les neutrons en vol. C'est absurde et un peu compliqué à mettre en place avec la condition aux limites de vide. C'est également en contradiction avec l'hypothèse sous-jacente à la formulation classique des équations de transport, à savoir que la matière se déplace beaucoup plus lentement que les neutrons (voir section 6.3.9). Nous laissons donc, ici et pour la suite, le flux être transporté par le maillage quand celui-ci se déforme.

c. Conclusion

Des différentes évaluations que l'on a faites, on peut conclure que le SPN a été développé sans erreur et qu'il donne des résultats corrects. On a constaté, en outre, que le SP5 et le SP3 donnent des résultats très similaires sur Godiva. Etant donné que le SP5 coûte sensiblement plus cher en temps de calcul, nous avons utilisé le SP3 pour la suite.

Cependant, son application à Godiva est moyennement satisfaisante : coefficient multiplicatif sur-estimé et effets en réactivité de déformations sous-estimés. La cause de ces écarts semble être principalement l'approximation géométrique inhérente au SPN, qui suppose une géométrie plane (voir annexes C et D).

Il n'a pas été trouvé une méthode simple et efficace pour corriger cet effet du SPN. Il semble ainsi que le seul modèle neutronique capable de calculer correctement Godiva soit le transport sans approximation. L'objet de la thèse étant l'étude des méthodes de couplage, il a été décidé de ne pas développer un solveur de transport et de continuer l'étude des méthodes de couplage avec le SPN. On s'attend à un comportement physiquement correct mais entaché d'une erreur due à la modélisation neutronique.

11.2 Neutronique : la factorisation quasi-statique

11.2.1 Principe et intérêt de la factorisation

Dans les calculs cinétiques, on observe souvent une forte variation de la puissance du réacteur, et donc du flux intégré, sans déformation notable de la forme du flux. Cela est particulièrement vrai pour les RNR-Na où les effets globaux dominent (on a par exemple vu dans le paragraphe b. de la section 7.1.3 qu'une même perturbation géométrique déforme plus la forme du flux lorsque le spectre est thermalisé que lorsqu'il ne l'est pas), mais l'est aussi dans une certaine mesure pour les REP. Cette observation a donné l'idée [51, 52] de calculer séparément l'évolution de l'amplitude du flux et de sa forme. On factorise pour ce faire le flux comme le produit d'une amplitude, notée N et qui ne dépend que du temps, et d'une fonction dite de forme, notée \mathcal{F} qui peut dépendre de toutes les variables :

$$\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) = N(t)\mathcal{F}(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t). \quad (11.4)$$

Φ est le flux qui peut dépendre en général de la position \vec{r} , de la direction de propagation $\vec{\Omega}$, de l'énergie E et du temps t . La factorisation (11.4) n'est pour l'instant pas unique. Nous spécifions plus bas comment l'amplitude N et la forme \mathcal{F} sont choisies.

Cette factorisation est conçue pour que \mathcal{F} varie lentement en temps comparée à N . Il est alors possible d'introduire deux pas de temps. Un pas de temps fin, δt , pour le calcul de l'amplitude et un pas de temps large, Δt , pour le calcul de la forme. La méthode a un intérêt si le rapport $\frac{\Delta t}{\delta t}$ est grand.

Le calcul d'un flux dépendant du temps et de l'espace est toujours coûteux. Il s'agit souvent de l'étape la plus chère dans les calculs de transitoires couplées, et la factorisation quasi-statique, qui permet de réduire les appels aux solveurs neutroniques spatiaux, apparaît donc comme un allié naturel. De plus, nous verrons que l'amplitude N vérifie les équations de la cinétique point, qui sont souvent résolues par des codes spécialisés dans d'autres domaines de la physique des réacteurs que la neutronique (CATHARE [42] par exemple). Cette approche peut donc permettre de coupler ces codes efficacement avec des solveurs neutroniques, en tirant parti de leur capacité à résoudre les équations de la cinétique point en association avec d'autres disciplines. Pour ces raisons la factorisation quasi-statique nous paraît être une approche particulièrement adaptée aux calculs couplés cinétiques, et nous souhaitons la mettre en avant ici.

11.2.2 Forme générale de la cinétique

Nous allons réécrire les équations de la cinétique (par exemple (C.1) ou (11.1)) sous la forme générale :

$$I_{1/V} \frac{\partial}{\partial t} \Phi = (-Tr - D + F^p + S)\Phi + S_{n.ret.}, \quad (11.5)$$

avec (dans le formalisme multi-groupe) :

Opérateur	Diffusion : (8.9)	Transport : (C.1)	SPN simulé : (11.1)
$I_{1/V}$: Inertie	$\left(I_{1/V} \frac{\partial}{\partial t} \Phi\right)^g = \frac{1}{V^g} \frac{\partial \phi^g}{\partial t}$	$\left(I_{1/V} \frac{\partial}{\partial t} \Psi\right)^g = \frac{1}{V^g} \frac{\partial \psi^g}{\partial t}$	$\left(I_{1/V} \frac{\partial}{\partial t} \Phi\right)^{(g,i)} = \sum_j \frac{(-1)^{i+j}}{V^{(g,\min(i,j))}} \frac{\partial \phi^{(g,j)}}{\partial t}$
Tr : Transport	$(Tr\Phi)^g = -\nabla D^g \nabla \phi^g$	$(Tr\Psi)^g = \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi^g$	$(Tr\Phi)^{(g,i)} = -\nabla D^{(g,i)} \nabla \phi^{(g,i)}$
D : Disparition	$(D\Phi)^g = \sigma_{disp}^g \phi^g$	$(D\Psi)^g = \sigma_t^g \psi^g$	$(D\Phi)^{(g,i)} = \sigma_{disp}^{(g,i)} \phi^{(g,i)}$
F^p : Fission prompte	$(F^p\Phi)^g = \chi_p^g (1 - \beta) \sum_{g'} \nu \sigma_f^{g'} \phi^{g'}$	$(F^p\Psi)^g = \chi_p^g (1 - \beta) \sum_{g'} \nu \sigma_f^{g'} \int_S \psi^{g'}$	$(F^p\Phi)^{(g,i)} = \chi_p^{(g,i)} (1 - \beta) \sum_{(g',j)} \nu \sigma_f^{(g',j)} \phi^{(g',j)}$
S : Scattering	$(S\Phi)^g = \sum_{g' \neq g} \sigma_s^{g' \rightarrow g} \phi^{g'}$	$(S\Psi)^g = \sum_{g'} \int_S \sigma_s^{g' \rightarrow g} \psi^{g'}$	$(S\Phi)^{(g,i)} = \sum_{(g',j) \neq (g,i)} \sigma_s^{(g',j) \rightarrow (g,i)} \phi^{(g',j)}$
$S_{n.ret.}$: Source de neutrons retardés	$(S_{n.ret.})^g = \sum_l \chi_l^g \lambda_l C^l$	<i>idem diffusion</i>	<i>idem diffusion</i>

TABLEAU 11.5 – Définition des opérateurs généraux de la cinétique neutronique.

On se donne également les opérateurs de fission retardée et totale :

Opérateur	Diffusion : (8.9)	Transport : (C.1)	SPN simulé : (11.1)
F_l^d : Fission retardée	$\left(F_l^d \Phi\right)^g = \chi_l^g \beta_l \sum_{g'} \nu \sigma_f^{g'} \phi^{g'}$	$\left(F_l^d \Psi\right)^g = \chi_l^g \beta_l \sum_{g'} \nu \sigma_f^{g'} \int_S \psi^{g'}$	$\left(F_l^d \Phi\right)^{(g,i)} = \chi_l^{(g,i)} \beta_l \sum_{(g',j)} \nu \sigma_f^{(g',j)} \phi^{(g',j)}$
F : Fission totale	$F = F^p + \sum_l F_l^d$	<i>idem diffusion</i>	<i>idem diffusion</i>

TABLEAU 11.6 – Définition des opérateurs de fission retardée et totale.

Ces définitions sont classiques, sauf en ce qui concerne l'opérateur d'inertie qui est généralement simplement noté $\frac{1}{V}$. On utilise une notation d'opérateur pour pouvoir y inclure les termes non diagonaux contenant des dérivées temporelles dans le SPN simulé (le terme source $S_{supl.}^{(g,i)}$ de (11.1), que l'on a fusionné avec $\frac{1}{V^{(g,i)}} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\phi}_0^{(g,i)}$). On va ainsi généraliser la méthode quasi-statique pour pouvoir l'appliquer au SPN simulé.

Rappelons que l'équation d'évolution du flux est associée à celle des précurseurs de neutrons retardés :

$$\frac{\partial C^l}{\partial t} = -\lambda_l C^l + \sum_{g'} \beta_l \nu \sigma_f^{g'} \phi^{g'} \quad (11.6)$$

11.2.3 Les équations quasi-statiques complètes

On peut maintenant spécifier la condition qui définit comment la factorisation (11.4) est faite. Elle consiste à prendre :

$$\langle I_{1/V} \mathcal{F}, \Phi_0^* \rangle = \text{constante}. \quad (11.7)$$

Ici Φ_0^* est le flux adjoint calculé sur l'état initial et les crochets dénotent le produit scalaire classique (intégrale du produit sur les variables d'espace, d'énergie et d'angle). On pourrait choisir ici une autre fonction que Φ_0^* pour faire la normalisation, et on obtiendrait des résultats identiques à ceux qui vont suivre, en remplaçant partout Φ_0^* par cette nouvelle fonction. Cependant, le choix de Φ_0^* permet d'obtenir des paramètres de cinétique point relativement stables, ce qui est important pour que la méthode ait un intérêt. Ce point est expliqué dans [29]. On y montre que l'utilisation du flux adjoint permet d'éliminer la dépendance du quotient ρ/Λ (la cinétique point y est très sensible), au premier ordre, en les variations du flux.

Injectons la factorisation (11.4) dans l'équation cinétique (11.5). On obtient :

$$I_{1/V} N \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{F} + I_{1/V} \mathcal{F} \frac{d}{dt} N = N(-Tr - D + F^p + S) \mathcal{F} + S_{n.ret.}. \quad (11.8)$$

Pour obtenir une équation sur N on multiplie (11.8) par Φ_0^* et on intègre :

$$N \left\langle I_{1/V} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{F}, \Phi_0^* \right\rangle + \frac{dN}{dt} \langle I_{1/V} \mathcal{F}, \Phi_0^* \rangle = N \langle (-Tr - D + F^p + S) \mathcal{F}, \Phi_0^* \rangle + \langle S_{n.ret.}, \Phi_0^* \rangle.$$

Le premier terme est nul en vertu de (11.7). On obtient ainsi, en divisant l'équation par $\langle I_{1/V} \mathcal{F}, \Phi_0^* \rangle$:

$$\frac{dN}{dt} = \frac{\rho - \beta_{eff}}{\Lambda} N + \sum_l \lambda_l c_l, \quad (11.9)$$

avec (χ_l est le vecteur des (χ_l^g))

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{\langle (-Tr - D + F + S) \mathcal{F}, \Phi_0^* \rangle}{\langle F \mathcal{F}, \Phi_0^* \rangle}, \\ \beta_{eff} &= \frac{\langle \sum_l F_l^d \mathcal{F}, \Phi_0^* \rangle}{\langle F \mathcal{F}, \Phi_0^* \rangle}, \\ \Lambda &= \frac{\langle I_{1/V} \mathcal{F}, \Phi_0^* \rangle}{\langle F \mathcal{F}, \Phi_0^* \rangle} \text{ et} \\ c_l &= \frac{\langle \chi_l C^l, \Phi_0^* \rangle}{\langle I_{1/V} \mathcal{F}, \Phi_0^* \rangle}. \end{aligned} \quad (11.10)$$

L'équation d'évolution de c_l est obtenue en multipliant 11.6 par χ_l puis en prenant le produit scalaire avec Φ_0^* . On obtient :

$$\frac{dc_l}{dt} = -\lambda_l c_l + \frac{\beta_{eff}^l}{\Lambda} N, \quad (11.11)$$

avec :

$$\beta_{eff}^l = \frac{\langle F_l^d \mathcal{F}, \Phi_0^* \rangle}{\langle F \mathcal{F}, \Phi_0^* \rangle}.$$

Il est visible que $\beta_{eff} = \sum_l \beta_{eff}^l$.

(11.9) et (11.11) forment les équations de la cinétique point. On peut les coupler avec la résolution de l'équation cinétique complète exprimée avec N et \mathcal{F} : (11.8). On obtient ainsi les équations dites quasi-statiques, que l'on peut réécrire comme suit :

$$\left\{ \begin{array}{l} I_{1/V} \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{F} + \mathcal{F} \frac{1}{N} \frac{dN}{dt} \right) = (-Tr - D + F^p + S) \mathcal{F} + \frac{S_{n.ret.}}{N} \\ \frac{\partial C^l}{\partial t} = -\lambda_l C^l + N \sum_{g'} \beta_l \nu \sigma_f^{g'} \mathcal{F}^{g'} \end{array} \right\} \text{ Cinétique de la forme du flux}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dN}{dt} = \frac{\rho - \beta_{eff}}{\Lambda} N + \sum_l \lambda_l c_l \\ \frac{dc_l}{dt} = -\lambda_l c_l + \frac{\beta_{eff}^l}{\Lambda} N. \end{array} \right\} \text{ Cinétique point : évolution de l'amplitude}$$

(11.12)

Insistons sur le fait que ces équations ont été obtenues sans approximation et que la résolution complète de (11.12) donne donc la solution exacte du problème cinétique.

11.2.4 Les deux approches (IQM et PCQM) pour la résolution du système quasi-statique

Deux approches existent dans la littérature pour la résolution du système (11.12). L'approche historique [81], l'*Improved Quasi-static Method* (IQM), et une variante plus récente [31], la *Predictor-Corrector Quasi-static Method* (PCQM).

a. L'*Improved Quasi-static Method* (IQM)

Dans cette approche, on cherche à converger la résolution des deux ensembles d'équations couplées qui forment le système (11.12). On itère donc entre les résolutions de la cinétique point et de la forme, en commençant par la cinétique point (la forme, issue du pas de temps précédent ou d'un calcul stationnaire, est supposée constante pour la première itération). La convergence est évaluée à partir de la contrainte (11.7). A l'issue du processus itératif, la forme est renormalisée de façon à ce que (11.7) soit vérifiée de manière exacte. Cette renormalisation est importante pour la validité des équations de la cinétique point. Il ne faut pas oublier de mettre également à jour les concentrations de précurseurs quand on renormalise le flux (il s'agit de fonctions affines du coefficient de renormalisation d'après (8.11)).

b. La *Predictor-Corrector Quasi-static Method* (PCQM)

Cette fois on souhaite commencer par un calcul spatial, pour éviter que la cinétique point n'avance avec des paramètres issus du pas de temps précédent. Comme les équations de la forme issues de (11.12) peuvent difficilement se passer d'un calcul préliminaire de l'amplitude,

on traite, pour commencer, directement l'équation du flux non factorisé (11.5). La résolution étant faite sur un pas de temps large (sinon la factorisation quasi-statique n'a pas d'intérêt), on s'attend à ce que le flux issu de ce calcul soit entaché d'une erreur numérique importante. La PCQM suppose que cette erreur est essentiellement portée par l'amplitude. On élimine donc cette dernière en renormalisant le flux pour qu'il respecte (11.7), et on obtient ainsi une évaluation de la forme du flux. Les équations de la cinétique point sont ensuite résolues, et l'amplitude obtenue sert à reconstruire un flux (et à des concentrations de précurseurs) "corrigé".

c. Comparaison des méthodes

La PCQM est présentée dans [31] comme une amélioration par rapport à l'IQM, mais n'est pas envisagée lors de couplages multi-physiques. Cependant, dans ce cas, on va souhaiter associer les disciplines couplées à la neutronique à la résolution de la cinétique point. La PCQM, qui commence par un calcul spatial pour éviter de calculer l'amplitude avec retard, perd de son intérêt : le calcul de flux ne pourra prendre en compte l'influence des autres disciplines. A l'inverse, le processus itératif de l'IQM s'accommode bien de la nécessité de converger les calculs couplés, et on verra qu'il est possible de prédire l'évolution de la réactivité, le paramètre clef de la cinétique point, en fonction des résultats des disciplines couplées à la neutronique. L'IQM peut donc perdre ainsi une partie de son "retard" intrinsèque.

L'IQM semble ainsi plus adaptée pour les transitoires couplés. Même si l'on a également testé la PCQM, l'IQM a donc été privilégiée dans ce qui suit.

11.2.5 Résolution numérique du système quasi-statique

Les équations de la forme du flux peuvent être résolues par un solveur cinétique classique au prix d'adaptations mineures.

Pour les équations de la cinétique point, on a reproduit la méthode dite *Generalized Runge-Kutta* (GRK) qui est implémentée dans CRONOS et qui est détaillée et testée dans [29]. Informatiquement, le solveur cinétique point a été développé en C++ et un exécutable, qui est appelé par CAST3M, a été généré.

Détaillons un peu les modifications apportées au solveur cinétique pour résoudre les équations de la forme issues de (11.12), et qui est donc utilisé par l'IQM (voir section 11.2.4).

Un des objectifs de la décomposition du flux qui a amené au système (11.12) est de tirer parti des variations lentes de la forme, \mathcal{F} , pour la calculer sur de grands pas de temps. Une difficulté est que l'amplitude N , qui varie plus vite, intervient dans l'équation 3D. Il est donc nécessaire de faire particulièrement attention à l'ordre des termes en N dans l'équation sur \mathcal{F} . Nous présentons ici quatre schémas qui ont été testés. On note Δt la durée du pas de temps pour le calcul de la forme, et on suppose $t = 0$ au début du pas de temps.

Notons que quel que soit le schéma utilisé, l'accélération par rebalancing (voir paragraphe d. de la section 8.3.2) est utilisée sans avoir besoin d'adaptation particulière.

a. Présentation des schémas

Schéma "milieu" : On suppose que la cinétique point est résolue sur des pas de temps plus fins que l'équation sur la forme, et que l'on dispose donc d'une évaluation des valeurs de N et de $\frac{dN}{dt}$ en $\frac{\Delta t}{2}$. On utilise ces valeurs dans l'équation sur \mathcal{F} . On notant $\alpha = \frac{\Delta t}{N(\Delta t/2)} \frac{dN}{dt}(\Delta t/2)$, on obtient ainsi le θ -schéma suivant :

$$I_{1/V} \left(\frac{\mathcal{F}(\Delta t)(1 + \theta\alpha) - \mathcal{F}(0)(1 - (1 - \theta)\alpha)}{\Delta t} \right) = (-Tr - D + F^p + S)(\theta\mathcal{F}(\Delta t) + (1 - \theta)\mathcal{F}(0)) + \frac{S_{n.ret.}}{N(\Delta t/2)}. \quad (11.13)$$

La modification des termes diagonaux issus de l'opérateur $I_{1/V}$ sont traités simplement en multipliant la matrice de masse M , quand elle intervient dans (8.16), par $(1 + \theta\alpha)$, et, quand elle intervient dans (8.17), par $(1 - (1 - \theta)\alpha)$. Les termes non diagonaux de $I_{1/V}$ sont modifiés en multipliant le terme en $\frac{1}{\theta V^g \Delta t}$ de (C.26) par $(1 + \alpha\theta)$. Un calcul simple montre que (C.27) n'a pas besoin d'être modifiée.

Pour le traitement des précurseurs, on évalue N et \mathcal{F} au même moment. La source de fissions-précurseurs (8.13) modifiée s'obtient donc en posant $\widetilde{Cst}_1^g = Cst_1^g \frac{N(0)}{N(\Delta t/2)}$, $\widetilde{Cst}_2^g = Cst_2^g \frac{N(\Delta t)}{N(\Delta t/2)}$ et en divisant le dernier terme, en $C^l(0)$, par $N(\Delta t/2)$.

Schéma "moyen" : Cette fois-ci on suppose que l'on ne dispose pas d'information en $\frac{\Delta t}{2}$, et on utilise donc une moyenne pour centrer le schéma en N . On définit $N_{moyen} = \frac{N(\Delta t) + N(0)}{2}$, et $\alpha = \frac{N(\Delta t) - N(0)}{N_{moyen}}$. On obtient alors le même schéma que précédemment (11.13) en remplaçant $N(\Delta t/2)$ par N_{moyen} et en utilisant la nouvelle définition de α .

Schéma "équivalent" : On ne cherche plus à centrer le schéma en N mais à construire un schéma équivalent au schéma classique. On discrétise donc N et \mathcal{F} aux mêmes temps, ce qui donne, avec $\alpha_B = \frac{N(0)}{N(\Delta t)}$:

$$I_{1/V} \left(\frac{\mathcal{F}(\Delta t) - \mathcal{F}(0)\alpha_B}{\Delta t} \right) = (-Tr - D + F^p + S)(\theta\mathcal{F}(\Delta t) + (1 - \theta)\alpha_B\mathcal{F}(0)) + \frac{S_{n.ret.}}{N(\Delta t)}.$$

Cette fois-ci, pour définir ce schéma, il faut multiplier la matrice de masse M , quand elle intervient dans (8.17) par α_B et (C.27) par $1 + \theta(\alpha_B - 1)$. Lorsque θ est différent de 1 il faut aussi multiplier toutes les sources explicites par α_B . Enfin pour les précurseurs, par rapport à ce qui est expliqué plus haut pour le schéma "milieu", il faut remplacer $N(\Delta t/2)$ par $N(\Delta t)$.

Schéma "intégral" : Ce schéma, proposé dans [89], est basé sur une intégrale en temps de l'équation de forme sur Δt . Le terme en $\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{F}$ peut être traité de façon exacte. Celui en $\mathcal{F} \frac{1}{N} \frac{dN}{dt}$ est approximé par $\ln \left(\frac{N(\Delta t)}{N(0)} \right) \frac{\mathcal{F}(\Delta t) + \mathcal{F}(0)}{2}$. Les autres termes sont pris constants sur Δt . En posant $\alpha = \ln \left(\frac{N(\Delta t)}{N(0)} \right)$, on obtient :

$$I_{1/V} \left(\frac{\mathcal{F}(\Delta t) \left(1 + \frac{\alpha}{2} \right) - \mathcal{F}(0) \left(1 - \frac{\alpha}{2} \right)}{\Delta t} \right) = (-Tr - D + F^p + S)(\theta \mathcal{F}(\Delta t) + (1 - \theta) \mathcal{F}(0)) + \frac{S_{n.ret.}}{N(\Delta t/2)}.$$

Le traitement est quasiment identique à celui du schéma milieu, en remplaçant θ par 0.5 et en utilisant la nouvelle définition de α . La seule différence est le terme (C.27) qui doit maintenant être multiplié par $1 + \alpha(0.5 - \theta)$.

b. Comparaison des schémas

Pour ne pas s'étendre inutilement sur les comparaisons entre ces schémas, nous les classons simplement ici en fonction de ce qui a pu être observé qualitativement de leur comportement. Un schéma est considéré précis si l'erreur faite sur la condition de factorisation (11.7) lors d'un calcul couplé (ils seront présentés plus bas) avec de grands pas de temps est petite.

- Le schéma "équivalent" est le plus mauvais de tous, et de loin. C'est en effet le seul qui ne cherche pas à centrer l'influence de l'amplitude.
- Le schéma "moyen" suit, mais est déjà bien plus précis.
- Un gain net est encore réalisé en passant au schéma "milieu". Il semble que la cohérence, avec la cinétique point, du couple N et $\frac{dN}{dt}$ utilisé dans l'équation de forme soit importante.
- Enfin, le schéma "intégral" est encore un peu plus précis que le schéma "milieu", sauf au tout début du transitoire, où, pour une raison mal comprise, il produit une erreur assez importante. Pour cette raison, le schéma milieu lui a été préféré pour la suite.

Notons que l'importance de la précision des schémas telle qu'on la définit ici est toute relative, puisqu'on renormalise toujours la forme pour que la condition (11.7) soit vérifiée de façon exacte.

11.2.6 Simplifications du système d'équation quasi-statique

Il existe au moins trois façons de simplifier les équations quasi-statiques. Nous ne les avons pas utilisées, mais les passons en revue ici par souci d'exhaustivité.

a. Méthode quasi-statique originale

Cette méthode, décrite dans [29], consiste à négliger le terme en $\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{F}$ dans l'équation cinétique de la forme du flux. Elle est justifiée par le fait la forme du flux est construite pour varier lentement en temps.

L'équation devient alors :

$$I_{1/V} \left(\mathcal{F} \frac{1}{N} \frac{dN}{dt} \right) = (-Tr - D + F^p + S) \mathcal{F} + \frac{S_{n.ret.}}{N}$$

Grâce à l'absence de terme en $\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{F}$, elle peut être résolue par un solveur stationnaire. Elle nécessite quand même de calculer les concentrations locales des précurseurs dans le réacteur.

b. Méthode adiabatique

Dans cette méthode, que l'on retrouve dans [29] et [89], on néglige aussi le terme en $\frac{1}{N} \frac{dN}{dt}$. Cette hypothèse est juste dans les transitoires lents, pilotés par la cinétique des précurseurs.

L'équation de la forme du flux devient alors simplement :

$$(-Tr - D + F^p + S) \mathcal{F} + \frac{S_{n.ret.}}{N} = 0$$

Il n'y a plus de termes cinétique, mais les concentrations locales des précurseurs doivent toujours être calculées.

c. Approximation de la cinétique ponctuelle

Cette fois-ci on élimine la nécessité de calculer localement les concentrations des précurseurs en supposant qu'ils s'équilibrent instantanément. On pose alors directement l'équation critique telle qu'on l'a écrite ici (8.3) par exemple, dans le cas de la diffusion. La réactivité introduite dans la cinétique point est directement déduite du coefficient multiplicateur calculé par le solveur critique : $\rho = \frac{K_{eff} - 1}{K_{eff}}$. Notons qu'il faut alors définir une normalisation du flux.

Une discussion à propos de la validité de cette approche peut être trouvée dans [89].

Le gros intérêt de cette méthode est qu'elle peut être utilisée lorsque l'on ne dispose que d'un solveur critique.

11.2.7 Evaluation du solveur de cinétique point sur Godiva

Pour vérifier le solveur de cinétique point utilisé, le calcul des paramètres cinétiques (ce qui passe par un calcul de flux adjoint) et la cohérence de la cinétique point avec la cinétique spatiale, on confronte les résultats de la cinétique point à ceux d'un calcul 3D. On anticipe un peu sur la suite, puisqu'il s'agit en réalité du début du transitoire couplé que l'on verra plus loin. On ne s'intéresse ici qu'aux $1,5 \cdot 10^{-4}$ premières secondes, pendant lesquelles l'impact du couplage sur la neutronique est négligeable. On impose aux deux solveurs un excès en réactivité de 758pcm. Le β_{eff} calculé étant de 712pcm, on est critique prompt.

Les résultats sont donnés figure 11.5. La référence correspond au calcul en SP3 cinétique avec des pas de temps de 10^{-7} s (le pas de temps est convergé). Le solveur de cinétique point calcule automatiquement son pas de temps. Le cas "CP sans termes non diagonaux" illustre

l'importance des termes non diagonaux dans le calcul de Λ . Dans ce cas on ne les a pas pris en compte (on a utilisé l'opérateur d'inertie classique de diffusion, voir tableau 11.5), et on constate qu'alors la cinétique point ne donne pas les bons résultats. Le cas "CP avec termes non diagonaux" utilise des paramètres calculés sur l'état stationnaire initial, en prenant bien en compte les termes non diagonaux de $I_{1/V}$ dans le calcul de Λ . Les résultats sont cette fois bien cohérents avec ceux de la cinétique spatiale. Pour information, on trouve un Λ de $5.449 \cdot 10^{-9}$ s (et $4.309 \cdot 10^{-9}$ s sans les termes non diagonaux). C'est environ deux ordres de grandeur inférieur à ce qui est obtenu en RNR-Na, où l'on a déjà des valeurs deux à trois ordres de grandeur inférieures qu'en REP.

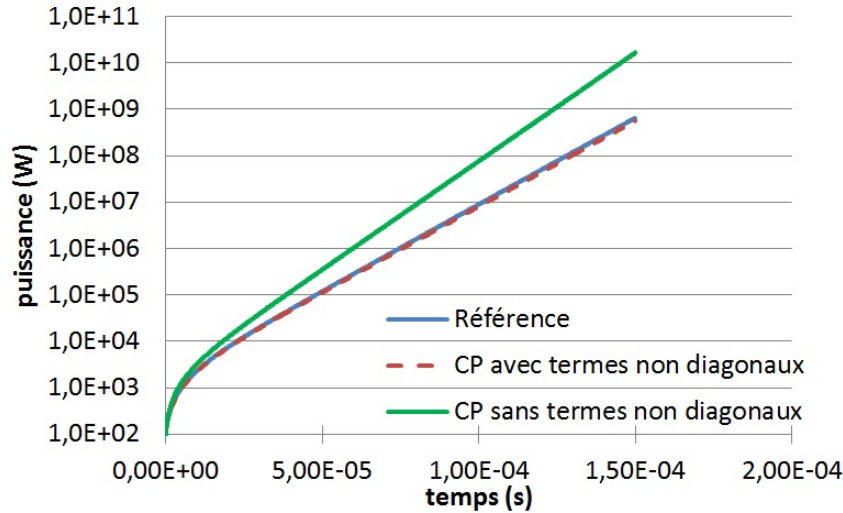


FIGURE 11.5 – Evaluation de la cinétique point sur Godiva.

11.3 Thermique

On traite l'équation de diffusion thermique classique (T est la température, ρ la masse volumique, C_p la capacité thermique spécifique, λ la conductivité thermique et P la puissance volumique) :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \Delta T + P.$$

ρ , C_p et λ sont données, pour Godiva, dans le tableau 10.1. La puissance P est, quant à elle, déterminée par le calcul neutronique.

Pour résoudre l'équation, on utilise des différences finies sur le terme avec la dérivée temporelle et un θ -schéma sur celui avec des dérivées spatiales. La puissance est supposée fixée ici. On note, comme précédemment, le pas de temps Δt et on suppose $t = 0$ au début du pas de temps. On obtient ainsi :

$$\rho C_p \frac{T(\Delta t) - T(0)}{\Delta t} = \lambda \Delta (\theta T(\Delta t) + (1 - \theta)T(0)) + P. \quad (11.14)$$

On impose, au bord de la sphère, $T = 0$ pour les calculs stationnaires et $\nabla T = 0$ (soit un flux de chaleur nul) pour les calculs instationnaires. Ce type de problème peut être résolu

facilement, par la méthode des éléments finis, par CAST3M et nous ne nous étendrons pas dessus. Seuls les effets relatifs de température nous intéressent, et c'est pourquoi nous imposons $T = 0$ au bord. Les températures données par la suite doivent être vues comme un écart par rapport à la température initialement imposée au bord.

11.4 Mécanique

Une présentation détaillée des équations survolées ici peut être trouvée dans [67]. Dans cette section, les tenseurs sont soulignés et leur dimension est indiquée par le nombre de soulignements.

Nous traitons ici un problème cinétique d'élasticité linéaire (petites déformations), sans précontrainte, d'un matériau isotrope.

Un problème d'élasticité linéaire peut s'exprimer ainsi :

Trouver le champ de déplacement \underline{u} cinématiquement admissible (régulier et qui vérifie les conditions aux limites) et le champ de tenseur des contraintes $\underline{\underline{\sigma}}$ statiquement admissible (régulier, symétrique, qui vérifie les conditions aux limites et $\text{div} \underline{\underline{\sigma}} + \underline{f} = \rho \underline{\gamma}$, avec \underline{f} force volumique s'exerçant sur le système, ρ la densité et $\underline{\gamma}$ le vecteur accélération) reliés par la loi de comportement du matériau.

Dans le cas de l'élasticité linéaire sans précontrainte, la loi de comportement est une relation linéaire entre $\underline{\underline{\sigma}}$ et $\underline{\underline{\epsilon}}$, le tenseur de déformation ($\underline{\underline{\epsilon}} = \frac{1}{2} (\underline{\nabla u} + \underline{\nabla u}^t)$, avec $\underline{\nabla u}$ la jacobienne de \underline{u}) :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\epsilon}} - (T - T_0) \underline{\underline{\kappa}}.$$

Pour un matériau isotrope, cette loi s'écrit simplement (T et T_0 sont les températures courante et initiale, α est le coefficient de dilatation thermique, λ et μ sont les coefficients de Lamé caractéristiques du matériau, et $\kappa = \frac{3\lambda + 2\mu}{3}$) :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \lambda \text{Tr}(\underline{\underline{\epsilon}}) \underline{\underline{1}} + 2\mu \underline{\underline{\epsilon}} - 3\kappa \alpha (T - T_0) \underline{\underline{1}}. \quad (11.15)$$

λ , μ et K peuvent se déduire du module de Young E et du coefficient de Poisson ν (donnés pour Godiva dans le tableau 10.1) ainsi :

$$\lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}, \quad \mu = \frac{E}{2(1+\nu)}, \quad \kappa = \frac{E}{3(1-2\nu)}.$$

Nous admettons que ce problème peut s'écrire sous la forme équivalente (dite formulation faible, ou formulation variationnelle, voir section 8.1), en l'absence de force extérieure :

Trouver $\underline{\underline{\sigma}}$ et \underline{u} admissibles vérifiant $\forall \hat{\underline{u}}$ déplacement admissible :

$$\int_{\Omega_0} \rho \underline{\gamma} \cdot \hat{\underline{u}} d\Omega_0 + \int_{\Omega_0} \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\epsilon}}(\hat{\underline{u}}) d\Omega_0 = 0. \quad (11.16)$$

On note que les intégrales portent sur Ω_0 , c'est à dire la configuration de référence (non déformée). On est dans le cadre de l'hypothèse de petites déformations.

Suivant la démarche de la section 8.1, on introduit maintenant les fonctions tests de la méthode des éléments finis notées $\underline{\xi}_i$. Notons qu'elles sont ici vectorielles. On va résoudre le problème (11.16) sur l'espace vectoriel de dimension finie généré par les $\underline{\xi}_i$. On cherche donc le déplacement \underline{u} comme une combinaison linéaire des $\underline{\xi}_i$: $\underline{u} = \sum_i u_i \underline{\xi}_i$. Remarquons que l'on a l'accélération simplement : $\underline{\gamma} = \sum_i \ddot{u}_i \underline{\xi}_i$. On note U le vecteur des u_i . On introduit également les déformations \underline{b}_i associées aux déplacements élémentaires $\underline{\xi}_i$: $\underline{b}_i = \frac{1}{2} \left(\underline{\nabla} \underline{\xi}_i + \underline{\nabla} \underline{\xi}_i^t \right)$.

En injectant (11.15) dans (11.16), en décomposant déformation et accélération sur la base des $\underline{\xi}_i$ et en testant l'égalité sur tous les vecteurs de la base, on obtient le système linéaire :

$$M\ddot{U} + KU = F, \quad (11.17)$$

avec :

- $(M)_{ij} = \int_{\Omega_0} \rho \underline{\xi}_i \cdot \underline{\xi}_j d\Omega_0$. M est la matrice de masse,
- $(K)_{ij} = \int_{\Omega_0} \left(\lambda \text{Tr}(\underline{b}_i) \text{Tr}(\underline{b}_j) + 2\mu \text{Tr}(\underline{b}_i \cdot \underline{b}_j) \right) d\Omega_0$. K est la matrice de rigidité,
- $(F)_i = \int_{\Omega_0} 3\kappa\alpha(T - T_0) \text{Tr}(\underline{b}_i) d\Omega_0$.

Le système (11.17) ne dissipe pas d'énergie, ce qui n'est pas réaliste. Pour cette raison, on introduit généralement un terme dissipatif, et on résout à la place :

$$M\ddot{U} + C\dot{U} + KU = F, \quad (11.18)$$

C est la matrice d'amortissement. On la choisit ici proportionnelle à la matrice de masse : $C = aM$. a est fixé arbitrairement (20000s⁻¹ ici) pour amortir les oscillations mécaniques sans les éliminer totalement.

On a développé, pour résoudre (11.18), un schéma de Newmark, méthode de résolution classique en mécanique. Plus précisément, on utilise le schéma de Newmark à accélération moyenne qui est très robuste : il est inconditionnellement stable. Il consiste à approximer déplacement et vitesse par des développements limités faisant apparaître l'accélération courante. On note ici encore le pas de temps Δt et on suppose $t = 0$ au début du pas de temps :

$$U(\Delta t) = U(0) + \Delta t \dot{U}(0) + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{1}{2} \ddot{U}(0) + \frac{1}{2} \ddot{U}(\Delta t) \right),$$

$$\dot{U}(\Delta t) = \dot{U}(0) + \Delta t \left(\frac{1}{2} \ddot{U}(0) + \frac{1}{2} \ddot{U}(\Delta t) \right).$$

En injectant ces développements limités dans (11.18), on obtient :

$$\left(M + C \frac{\Delta t}{2} + K \frac{\Delta t^2}{4} \right) \ddot{U}(\Delta t) = -C \left(\dot{U}(0) + \frac{\Delta t}{2} \ddot{U}(0) \right)$$

$$-K \left(U(0) + \Delta t \dot{U}(0) + \frac{\Delta t^2}{4} \ddot{U}(0) \right) + F(t).$$

La résolution de ce système donne $\ddot{U}(\Delta t)$, puis, en l'injectant dans les développements limités de U et de \dot{U} , on obtient $U(\Delta t)$ et $\dot{U}(\Delta t)$.

On associe à cette équation des conditions aux limites de déplacement nul au centre de la sphère et de surface libre ($F = 0$) à sa périphérie.

Calculs couplés

Nous avons défini au chapitre précédent comment chacune des disciplines était résolue. Nous nous intéressons maintenant aux calculs couplés, travail qui a fait l’objet d’une publication [84]. Commençons par l’établissement d’une référence pour la suite.

12.1 Etablissement d’une référence

12.1.1 Avec une neutronique cinétique spatiale ”complète”

Nous commençons en utilisant les équations neutroniques cinétiques spatiales sans la factorisation quasi-statique (on résout directement (11.1)).

On va utiliser pour cela la technique de couplage la plus simple et la plus utilisée, celle de Gauss-Seidel (voir section 3.2 pour plus de détails à son propos), représentée figure 12.1. On pourra ainsi juger des gains des autres méthodes vis à vis de celle-ci.

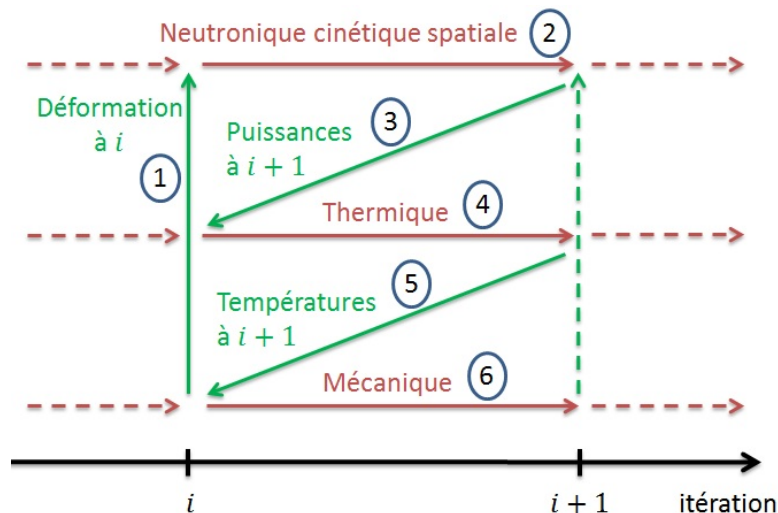


FIGURE 12.1 – Schéma de Gauss-Seidel pour la réalisation d’un couplage sur Godiva, avec neutronique cinétique spatiale.

Ces itérations de Gauss-Seidel sont réalisées à l'initialisation et à chaque pas de temps pour converger sur un schéma global implicite (voir section 4.1.3 pour la réalisation de schémas non explicites avec Gauss-Seidel ou Newton). La neutronique et la thermique sont également implicites par rapport à leurs propres variables. Dans les faits, sur les pas de temps convergés, une seule itération est nécessaire à chaque pas de temps, ce qui revient à avoir un schéma de couplage explicite. Le même pas de temps est utilisé pour chaque discipline et pour le couplage.

Le transitoire est initialisé comme suit :

1. La matrice de fission est normalisée de façon à imposer une réactivité initiale de 758pcm. Cette réactivité initiale a été ajustée pour reproduire la cinétique neutronique observée pendant la première phase du burst de puissance le plus violent réalisé. On obtient ainsi une période (temps de multiplication par e de la puissance) de $11.6\mu s$, comme dans l'expérience (voir tableau 10.2).
2. On normalise le flux initial à 100W.
3. Un état stationnaire global est calculé. Deux itérations sont suffisantes. On obtient une température moyenne initiale de 0.83K et une dilatation initiale de $10^{-4}cm$.

On utilise du SP3 à 9 groupes d'énergie (donc 18 pseudo-groupes) en neutronique (voir section 11.1.3 pour une évaluation du modèle). Ce sera le cas pour tous les calculs du chapitre.

Les courbes d'évolution de la puissance, de la température moyenne et du rayon de la sphère sont données respectivement figures 12.2, 12.3 et 12.4, pour différents pas de temps. On constate que le pas de temps est convergé à partir de $10^{-7}s$ et que la neutronique l'impose : la courbe de puissance varie en fonction du pas de temps dès le début du transitoire, alors que les autres disciplines ne jouent pas encore de rôle.

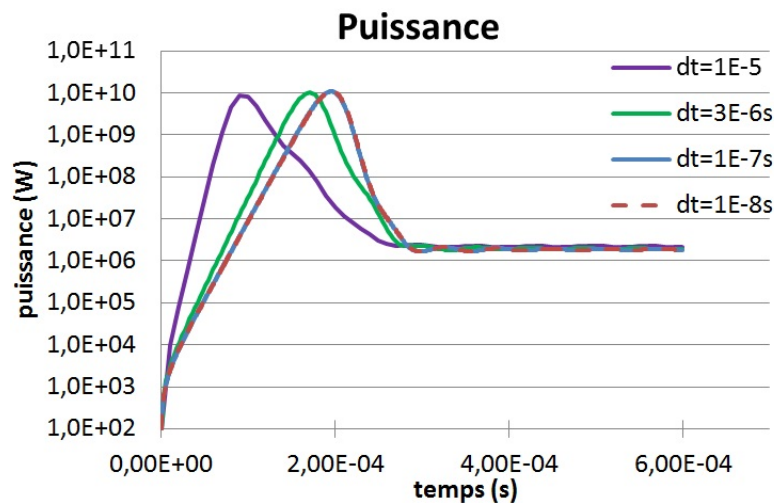


FIGURE 12.2 – Evolution de la puissance, pour différents pas de temps, pendant le transitoire couplé de Godiva, avec cinétique neutronique spatiale.

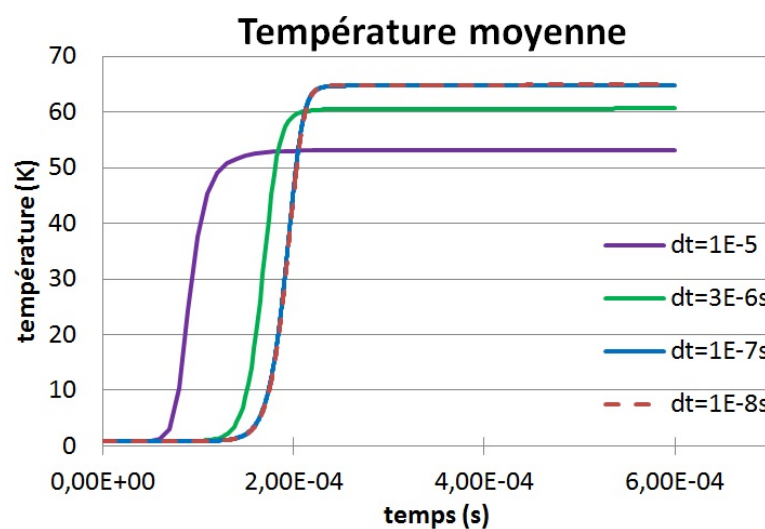


FIGURE 12.3 – Evolution de la température moyenne, pour différents pas de temps, pendant le transitoire couplé de Godiva, avec cinétique neutronique spatiale.

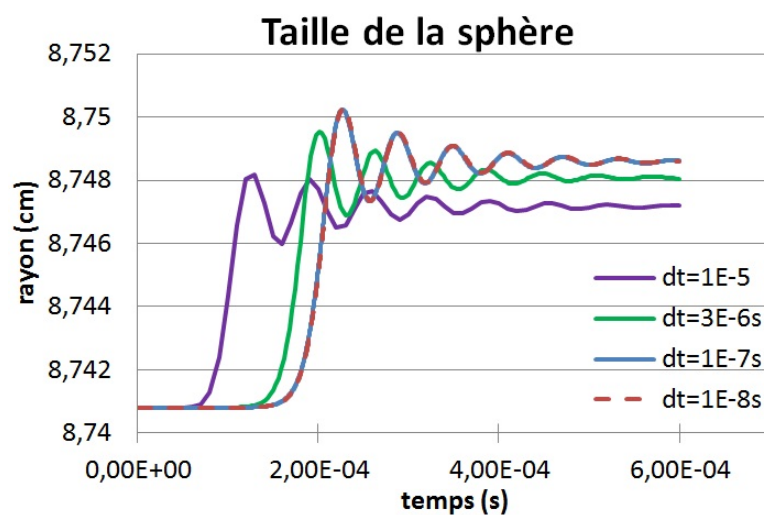


FIGURE 12.4 – Evolution de la taille de la sphère, pour différents pas de temps, pendant le transitoire couplé de Godiva, avec cinétique neutronique spatiale.

Les principaux résultats obtenus, avec un pas de temps de 10^{-7} s (ce sera le calcul de référence à l'avenir), sont donnés tableau 12.1 et sont comparés à l'expérience (voir tableau 10.2) et à ceux de PSI (voir section 10.2).

Grandeur	Expérience	Calcul PSI	Nos résultats
"Période" (temps de multiplication par e de la puissance sans contre-réaction)	$11.6\mu\text{s}$	$11.7\mu\text{s}$	$11.6\mu\text{s}$
Excès en réactivité initial	1.082\$		758pcm, soit 1.065\$
Puissance maximale	8.6GW	5.2GW	10.8GW
Élévation de température moyenne finale		38K	65K
Variation de volume		0.13%	0.27%

TABLEAU 12.1 – Résultats de référence (neutronique cinétique spatiale) pour le couplage sur Godiva, comparés à l'expérience et à ceux de PSI.

On reproduit bien les formes des courbes obtenues par PSI (figure 10.3), avec notamment une stabilisation de la puissance un peu au dessus du MW et des oscillations mécaniques de fréquence similaire.

L'excès de réactivité initial a été ajusté empiriquement dans notre cas, et probablement également à PSI, pour reproduire la période de l'expérience. L'excès de réactivité étant exprimé en dollars, la valeur de celui-ci est importante. Il s'agit de la valeur du β_{eff} telle que définie section 11.2.3. On trouve dans notre cas 712pcm. Cette valeur n'est pas donnée dans les comptes rendus de l'expérience. Notons que le β_{eff} est différent du β intervenant dans les équations cinétique, par exemple (C.1), qui vaut dans notre cas 685pcm. La différence tient au fait que la définition du β_{eff} pondère les neutrons par leur importance neutronique.

On a une puissance au pic, une température moyenne finale et une dilatation de la sphère plus grandes que l'expérience et que calculées par PSI. Il est difficile d'en connaître la raison, même si l'on peut soupçonner le modèle neutronique qui est, comme nous l'avons vu section 11.1.3, imparfait. Nos résultats sont tout de même relativement proches de l'expérience et reproduisent bien la physique du phénomène qui est un couplage fort entre neutronique et thermomécanique, comme nous le souhaitons.

12.1.2 Avec la factorisation quasi-statique

Nous utilisons ici la factorisation quasi-statique présentée section 11.2. Cette formulation du problème cinétique semble en effet prometteuse pour la résolution de problèmes couplés. Les équations de la cinétique point, qui sont simples et rapides à résoudre, peuvent être résolues sur des pas de temps fins en liaison avec les disciplines couplées à la neutronique. Il est fréquent par exemple que des codes de thermo-hydraulique embarquent leur propre solveur de cinétique point. On peut ainsi réaliser un couplage précis, car utilisant des pas de temps fins, avec une neutronique très simplifiée et corriger celle-ci par des appels (plus rares que si c'était la seule source d'information sur le comportement neutronique du système) à une neutronique spatiale adaptée. Rappelons que, malgré son nom, la factorisation quasi-statique n'est pas une dégradation du modèle, elle n'implique aucune hypothèse.

On utilise un schéma de couplage qui tire parti de la décomposition du calcul neutronique. La cinétique point, la thermique et la mécanique sont chaînées, comme l'illustre la figure 12.5, sur des pas de temps δt . L'équation d'évolution de la forme du flux est, quant à elle, couplée avec la réalisation de n pas de temps du chaînage cinétique point - thermique - mécanique. Le couplage est simplement explicite et est illustré, pour l'approche IQM (voir section 11.2.4), figure 12.6. La forme du flux obtenu par le calcul spatial est renormalisée pour que la condition (11.7) soit vérifiée de façon exacte. Insistons sur le fait que même si l'algorithme IQM est normalement itératif, on ne recalcule pas ici un pas de temps. On ne fait qu'une seule itération. La réactivité est donc constante sur le pas de temps.

Pour reproduire l'approche PCQM que l'on teste plus bas, il suffit d'inverser l'ordre d'exécution indiqué figure 12.6 : la neutronique spatiale est appelée en première (et on remplace calcul de forme par calcul de flux), et est suivie par la cinétique point, la thermique et la mécanique. On note dans les deux cas le pas de temps global $\Delta t (= n\delta t)$.

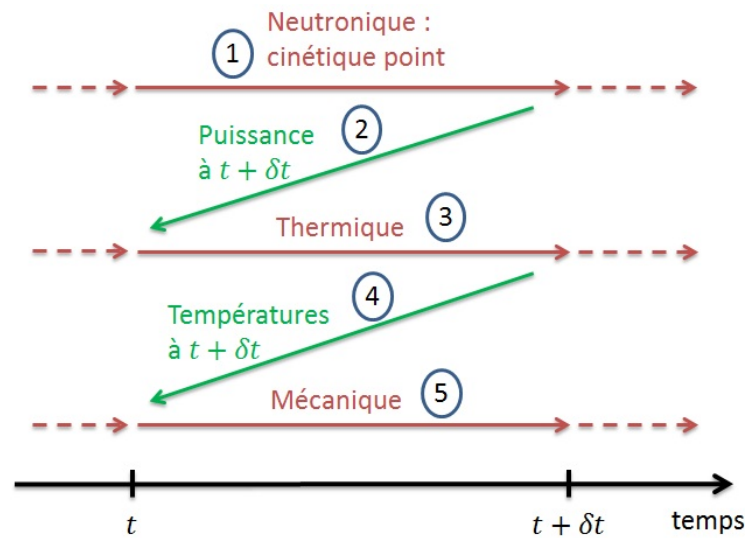


FIGURE 12.5 – Schéma de chaînage entre cinétique point, thermique et mécanique.

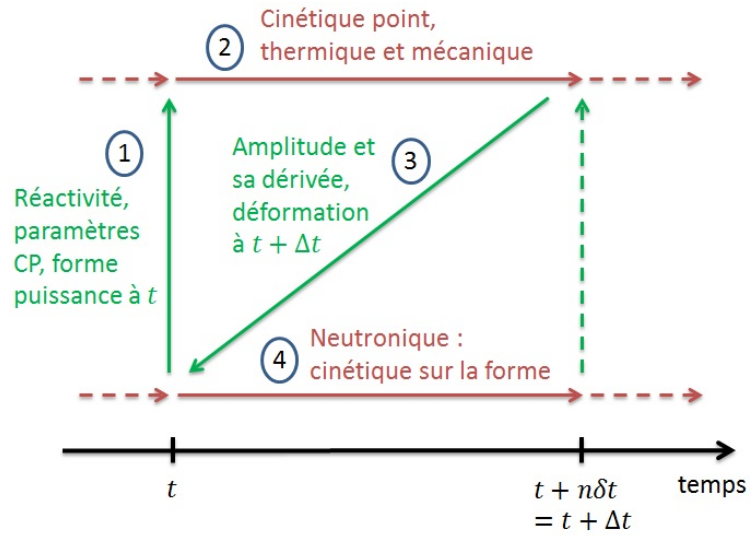


FIGURE 12.6 – Couplage entre cinétique de la forme du flux et le chaînage précédent.

δt est fixé, ici et pour la suite, à 10^{-7} s.

Les courbes d'évolution, obtenues par les approches IQM et PCQM, de la puissance, de la température moyenne et du rayon de la sphère sont données figures 12.7 à 12.9. Les principaux résultats sont résumés tableau 12.2. La "référence" est le couplage calculé sans la factorisation quasi-statique et avec des pas de temps de 10^{-7} s (voir section 12.1.1).

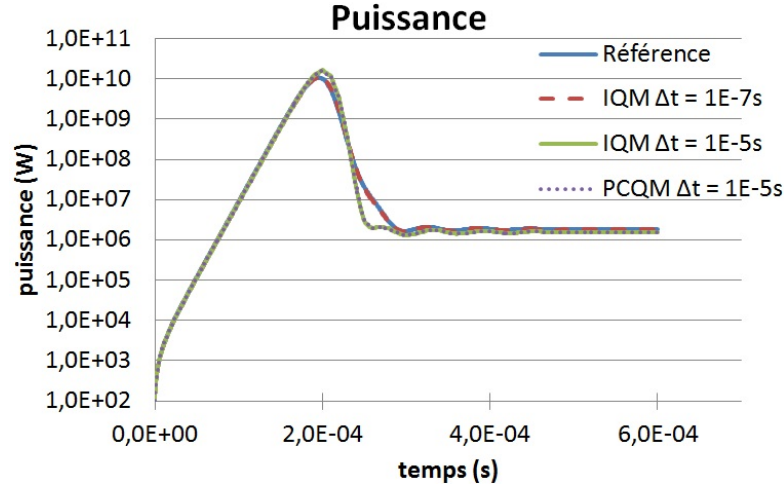


FIGURE 12.7 – Evolution de la puissance, pour différents pas de temps Δt , pendant le transitoire couplé de Godiva, avec factorisation quasi-statique et approches IQM et PCQM.

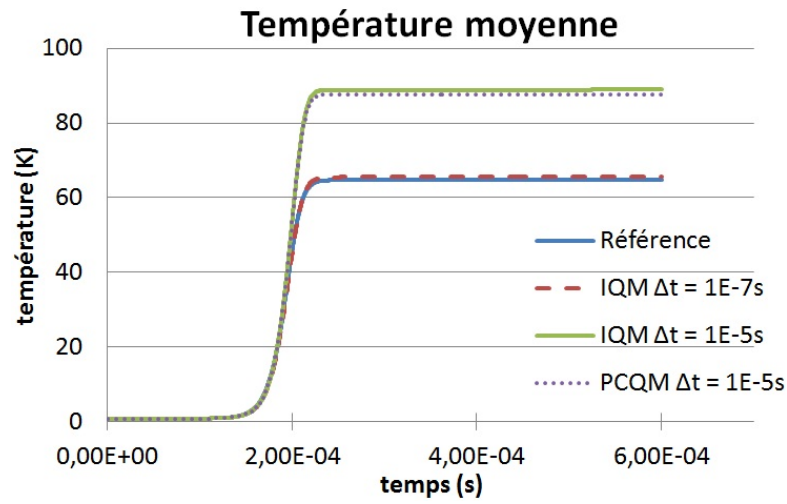


FIGURE 12.8 – Evolution de la température moyenne, pour différents pas de temps Δt , pendant le transitoire couplé de Godiva, avec factorisation quasi-statique et approches IQM et PCQM.

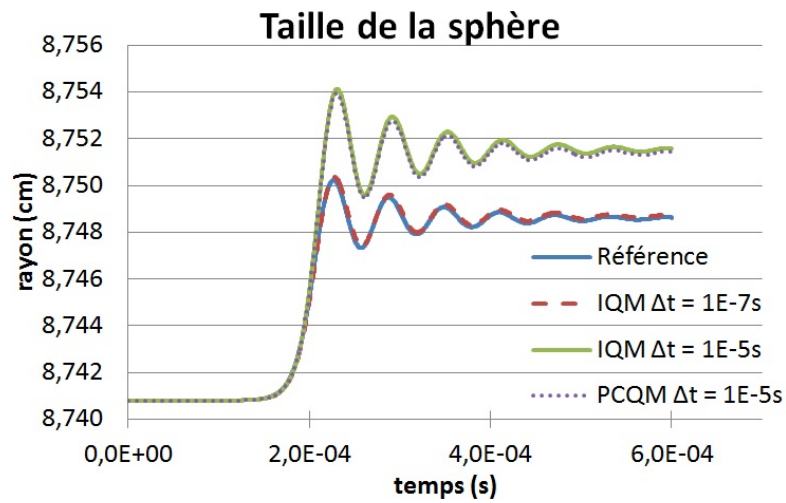


FIGURE 12.9 – Evolution de la taille de la sphère, pour différents pas de temps Δt , pendant le transitoire couplé de Godiva, avec factorisation quasi-statique et approches IQM et PCQM.

Grandeur	Référence ($\Delta t = 10^{-7}\text{s}$)	IQM $\Delta t = 10^{-7}\text{s}$	IQM $\Delta t = 10^{-5}\text{s}$	PCQM $\Delta t = 10^{-5}\text{s}$
Puissance maximale	10.8GW	10.9GW	16.4GW	16.2GW
Élévation de température moyenne finale	65K	66K	89K	89K
Variation de volume	0.27%	0.27%	0.37%	0.37%
Temps de calcul	5h38	5h57	13min	15min

TABLEAU 12.2 – Résultats obtenus avec la factorisation quasi-statique et les approches IQM et PCQM pour le couplage sur Godiva, avec différents pas de temps Δt .

Tout d’abord, on constate que l’algorithme IQM converge bien vers la référence (c’est bien sûr également le cas de la PCQM). En outre, les algorithmes IQM et PCQM ont un comportement similaire lorsque le pas de temps croît. En effet, l’approche PCQM utilise une réactivité ”amont”, mais qui ne tient pas compte de l’évolution de thermo-mécanique. C’est à peu près équivalent dans notre cas au fait de n’utiliser qu’une réactivité ”aval” comme le fait l’algorithme IQM ici (une seule itération est faite). En outre, parce qu’il est non itératif et parce qu’il fournit déjà une réactivité ”amont” (qui est mauvaise), l’algorithme PCQM est peu adapté aux techniques de couplage que l’on verra plus loin. Par la suite, on s’est donc concentré sur l’approche IQM pour l’étude des techniques de couplage.

La comparaison des temps de calcul permet de confirmer que ce sont bien les calculs neutroniques spatiaux qui coûtent cher (δt étant toujours égal à 10^{-7}s , les autres calculs sont faits le même nombre de fois). Dans les cas ”IQM”, le calcul de forme n’a pas à faire évoluer l’amplitude du flux, contrairement aux deux autres cas. On s’attendrait donc à gagner en temps de calcul, même avec des pas de temps Δt identiques. Cependant, la technique d’accélération par rebalancing utilisée ici (voir paragraphe d. section 8.3.2) gomme cet effet, ce qui nous amène à des temps de calcul comparables à pas de temps pour les calculs spatiaux identiques.

12.2 Travail sur les méthodes de couplage

12.2.1 Pas de temps fixe

On fait appel ici aux méthodes de couplage en transitoire, présentées au chapitre 4, pour tenter d’améliorer la précision du calcul quasi-statique avec des pas de temps Δt de 10^{-5}s (δt vaut toujours 10^{-7}s). Explicitons pour commencer les différentes approches testées. Nous verrons qu’elles se concentrent sur la réactivité, qui est ici, comme souvent, l’information la plus importante issue du calcul spatial.

a. Présentation des méthodes utilisées

Gauss-Seidel : Comme dans l’algorithme IQM original (voir section 11.2.4), on répète ici le calcul de chaque pas de temps Δt jusqu’à convergence (voir section 4.1.3 pour l’utilisation

de Gauss-Seidel dans un couplage en temps). La réactivité et le rayon de la sphère sont utilisés comme critères de convergence (on considère l'écart entre deux itérations successives ; les critères sont de 0.1pcm et de 10^{-5} cm respectivement). La condition (11.7) ne peut pas être utilisée : à cause de l'introduction de calculs non neutroniques, cette condition n'est pas toujours respectée à la convergence. Il est alors particulièrement important de renormaliser la forme obtenue pour imposer le respect de (11.7), pour que les équations de la cinétique point, basées sur cette condition, restent justes. A partir de la deuxième itération, la réactivité est interpolée linéairement, pour les calculs de cinétique point, entre t et $t + \Delta t$:

$$\rho(t + m\delta t) \approx \rho(t) + \frac{m\delta t}{\Delta t}(\rho(t + \Delta t) - \rho(t)).$$

Extrapolation linéaire : Il s'agit du "traitement d'ordre plus élevé des non-linéarités", expliqué section 4.2.2, et appliqué à la réactivité. Ainsi on cherche à prédire, pour les calculs de cinétique point, la réactivité en $t + m\delta t$ en fonction de la réactivité en t et en $t - \Delta t$. Cela donne (une seule itération est faite par pas de temps) :

$$\rho(t + m\delta t) \approx \rho(t) + \frac{m\delta t}{\Delta t}(\rho(t) - \rho(t - \Delta t)).$$

Contre-réaction : On cherche ici aussi à prédire la réactivité en $t + m\delta t$, mais cette fois en ne supposant plus la linéarité par rapport au temps, mais par rapport à un résultat du calcul mécanique (qui est fait tous les δt , comme la cinétique point). On introduit ainsi un retour dans le chaînage décrit figure 12.5. On choisit comme variable le rayon de la sphère, noté ici r , et on suppose que la réactivité est linéaire entre le rayon initial et le rayon courant, (et pas sur un intervalle Δt par exemple) pour éviter les erreurs numériques lorsque la dérivée en temps de cette variable s'annule. On écrit ainsi (là encore, une seule itération est faite par pas de temps) :

$$\rho(t + m\delta t) \approx \rho(t) + \frac{\rho(t) - \rho(0)}{r(t) - r(0)}(r(t + m\delta t) - r(t)).$$

Pas de temps décalés : Nous citons cette méthode pour expliquer qu'elle ne semble a priori pas adaptée au quasi-statique. L'idée, exposée à la section 4.2.1, est de décaler d'un demi pas de temps l'exécution des disciplines couplées pour qu'elles utilisent chacune les informations de milieux de pas de temps de l'autre. Cependant, dans le couplage calcul d'amplitude - calcul de forme, exposé en détail section 11.2.5, on utilise déjà des informations de début et de fin de pas de temps Δt issues de la cinétique point (notamment pour le calcul des précurseurs dans l'équation de forme). A cause de cela, il n'a pas été trouvé de schéma de couplage tirant réellement parti de l'idée d'un décalage des pas de temps.

b. Interprétation des résultats

On donne tableau 12.3 les principaux résultats obtenus avec ces méthodes.

Grandeur	IQM $\Delta t = 10^{-7}s$	IQM $\Delta t = 10^{-5}s$	Gauss- Seidel	Extra- polation linéaire	Contre- réaction
Puissance maximale	10.9GW	16.4GW	10.5GW	12.6GW	11.0GW
Elévation de température moyenne finale	66K	89K	64K	72K	66K
Variation de volume	0.27%	0.37%	0.27%	0.30%	0.28%
Temps de calcul	5h57	13min	25min	14min	14min

TABLEAU 12.3 – Résultats obtenus, sur Godiva, avec des pas de temps fixes $\Delta t = 10^{-5}s$ et l’approche IQM, pour différentes techniques de couplage.

Toutes les techniques de couplage testées ici améliorent significativement les résultats en les rapprochant de ceux du calcul convergé ”IQM $\Delta t = 10^{-7}s$ ”. Les itérations de Gauss-Seidel sont néanmoins coûteuses en temps de calcul et conduisent à sous-estimer légèrement le pic de puissance, probablement à cause de l’hypothèse de variation linéaire en temps de la réactivité qui y est faite. En réalité, à cause des oscillations visibles figure 12.9, la dérivée seconde en temps de la réactivité est forte. La méthode d’extrapolation linéaire souffre du même inconvénient, renforcé par la distance entre les points connus de réactivité et ceux prédits. La méthode de contre-réaction, elle, ne suppose qu’une relation linéaire entre la réactivité et un résultat de la thermo-mécanique calculé à chaque δt . Cela explique que la méthode soit la plus précise, alors même qu’elle n’affecte pas le temps de calcul.

On donne figure 12.10 l’évolution de la réactivité des différentes techniques testées ici. Le manque de précision de l’approche initial est visible. On voit également nettement les erreurs commises par l’extrapolation linéaire à proximité des extremums : la dérivée seconde de la réactivité y est maximale. Les pas de temps utilisés sont trop grands pour cette approche. Les méthodes de Gauss-Seidel et à contre-réaction permettent quant à elles de lisser efficacement la courbe et de se rapprocher de la référence. L’effet de l’hypothèse de linéarité dans l’algorithme de Gauss-Seidel est visible au niveau du premier minimum de réactivité : le pic est légèrement écrêté.

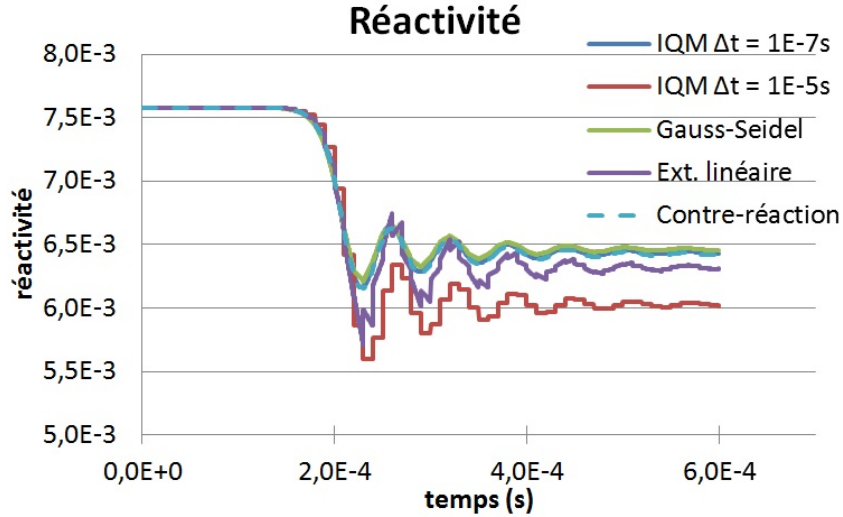


FIGURE 12.10 – Evolution de la réactivité, pour différentes techniques de couplage, avec $\Delta t = 10^{-5}$ s et l'approche IQM, pendant le transitoire couplé de Godiva.

Il est intéressant de voir au passage que l'état final n'est pas un état véritablement stationnaire puisque la réactivité est différente de 0. C'est un état stationnaire du point de vue des neutrons prompts : la réactivité finale est inférieure au β_{eff} et la puissance a diminué jusqu'à ce que le flux soit en équilibre avec les précurseurs. Sur une plus grande échelle de temps, on verrait une compétition entre l'augmentation naturelle de la puissance, pilotée par la vitesse d'évolution des concentrations de précurseurs, et la dilatation de la sphère (conduisant à une baisse de réactivité), jusqu'à ce que la réactivité ne devienne négative, et que la réaction en chaîne ne s'étouffe d'elle-même.

c. Note sur la méthode de contre-réaction

Nous avons supposé ici que la réactivité variait linéairement avec le rayon de la sphère pour définir la méthode de contre-réaction. Grâce à la faible déformation du système, le problème est bien linéaire et cette méthode donne de bons résultats. Il est cependant légitime de s'interroger sur la généralisation de cette méthode à d'autres cas d'application. Il est en fait tout à fait possible de définir des contre-réactions spatiales dans le cas général, à condition que Φ_0^* soit utilisé comme fonction de pondération et que le système n'ait pas trop évolué depuis $t = 0$.

Supposons que l'on connaisse à l'instant t la réactivité $\rho(t)$, la forme du flux $\mathcal{F}(t)$ et les différents opérateurs intervenant dans la définition de la réactivité en cinétique (11.10). Pour simplifier la suite, on notera simplement $H = Tr + D - F - S$. On cherche à prévoir la valeur de ρ en $t + \delta t$ sans refaire un calcul de forme. Explicitons l'incrément de réactivité entre t et $t + \delta t$ (les opérateurs, le forme du flux et la réactivité ont évolué d'un " δX " entre t et $t + \delta t$) :

$$\delta\rho = \rho(t + \delta t) - \rho(t) = -\frac{\langle (H(t) + \delta H)(\mathcal{F}(t) + \delta\mathcal{F}), \Phi_0^* \rangle}{\langle (F(t) + \delta F)(\mathcal{F}(t) + \delta\mathcal{F}), \Phi_0^* \rangle} + \frac{\langle H(t)\mathcal{F}(t), \Phi_0^* \rangle}{\langle F(t)\mathcal{F}(t), \Phi_0^* \rangle}.$$

En négligeant les termes de second ordre en les perturbations, on arrive à :

$$\delta\rho \approx -\frac{\langle \delta H\mathcal{F}(t) + H(t)\delta\mathcal{F}, \Phi_0^* \rangle}{\langle F(t)\mathcal{F}(t), \Phi_0^* \rangle}.$$

Le flux adjoint vérifie l'équation adjointe (voir section 6.3.1 pour une présentation de l'adjoint), c'est à dire $H(0)^* \Phi_0^* = 0$. Ainsi on a :

$$\delta\rho \approx -\frac{\langle \delta H \mathcal{F}(t) + (H(t) - H(0))\delta \mathcal{F}, \Phi_0^* \rangle}{\langle F(t)\mathcal{F}(t), \Phi_0^* \rangle}.$$

Sous l'hypothèse que la perturbation de l'opérateur H , entre 0 et t , est petite, il est possible d'écrire :

$$\delta\rho \approx -\frac{\langle \delta H \mathcal{F}(t), \Phi_0^* \rangle}{\langle F(t)\mathcal{F}(t), \Phi_0^* \rangle}.$$

Si on est capable de relier les perturbations des variables non neutroniques à celles de H , cette dernière équation permet de définir des contre-réactions spatiales. On remarque qu'il s'agit de la formule de perturbation classique déjà vue précédemment (6.5) dans le cas critique. Notons également que ce calcul n'est valable que si Φ_0^* est utilisé comme fonction de pondération dans la condition (11.7).

En outre, rien n'empêche de prendre une fonction de pondération dépendante du temps, ce qui pourrait permettre de se passer de l'hypothèse que H varie peu entre 0 et t .

12.2.2 Pas de temps variable

Le choix d'un pas de temps est toujours une affaire de compromis entre temps de calcul et précision. Si les méthodes présentées précédemment permettent d'utiliser de plus grands pas de temps, elles n'éliminent pas cette tension et ne donnent pas d'information sur la précision atteinte. En outre, il y a souvent différentes phases dans un transitoire, et utiliser un pas de temps unique ne peut alors pas être optimal.

Nous avons testé deux techniques classiques pour adapter automatiquement le pas de temps :

Pas de temps adaptatif : L'idée derrière cette stratégie est que la condition (11.7) donne une information simple sur l'erreur numérique faite lors d'un calcul de forme. On utilise la technique de Gauss-Seidel, initialisée par celle de contre-réaction. A la fin de chaque pas de temps Δt , on considère l'erreur sur la condition de normalisation (11.7). Si elle est supérieure à un certain critère (3% dans notre cas), l'intervalle de temps est recalculé avec des pas de temps divisés par deux. A l'inverse, si l'erreur est inférieure à une borne minimale (1.35% dans notre cas), le pas de temps est multiplié par deux pour la suite. La valeur initiale et maximale de Δt est fixée à $2^7 \delta t = 1.28 \cdot 10^{-5}$ s. Sa valeur minimale est bien sûr δt (soit 10^{-7} s).

Pas de temps prédictif : Cette fois-ci on cherche à éviter d'avoir à refaire un calcul. Considérons l'équation d'évolution de la forme dans le système quasi-statique (11.12). La source principale d'erreur dans son intégration numérique est probablement l'incohérence dans le ratio $\frac{1}{N} \frac{dN}{dt}$ entre cinétique spatiale et cinétique point. D'après les équations ponctuelles, il est égal à $\frac{\rho - \beta_{eff}}{\Lambda} + \frac{1}{N} \sum_l \lambda_l c_l$. Cette quantité varie principalement à cause de ρ , dont on utilise donc la variation pour déterminer quand faire un calcul de forme. On utilise ici la méthode de contre-réaction. Quand l'écart entre la réactivité prédite et la réactivité calculée par le calcul

de forme précédent est supérieur à un certain critère (5pcm ici), un calcul de forme est fait immédiatement. Un maximum de 128 pas de temps δt par pas de temps Δt est fixé. Le critère de 5pcm a été choisi pour donner des pas de temps similaires à la méthode à pas de temps adaptatifs à la première oscillation de réactivité.

Les principaux résultats obtenus avec ces méthodes sont donnés tableau 12.4.

Grandeur	Ref. QS, $\Delta t = 10^{-7}$ s	Pas de temps adaptatif	Pas de temps prédicatif
Puissance maximale	10.9GW	10.8GW	10.9GW
Elévation de température moyenne finale	66K	65K	66K
Variation de volume	0.27%	0.27%	0.27%
Temps de calcul	5h57	39min	16min

TABLEAU 12.4 – Résultats obtenus, sur Godiva, avec différentes techniques d'adaptation du pas de temps et l'approche IQM.

Les deux méthodes permettent d'obtenir des résultats très proches de la référence. Comme on pouvait s'y attendre, la méthode à pas de temps prédictifs est plus rapide puisqu'aucun calcul n'a eu besoin d'être refait.

L'évolution de la taille des pas de temps est donnée figure 12.11. Les deux stratégies s'adaptent bien à l'évolution du transitoire. Le pas de temps est maximal au début, avant que la sphère ne se dilate, devient minimum pour le pic de puissance, réaugmente régulièrement à chaque extremum de la courbe de réactivité et tend à raugmenter à la fin du transitoire.

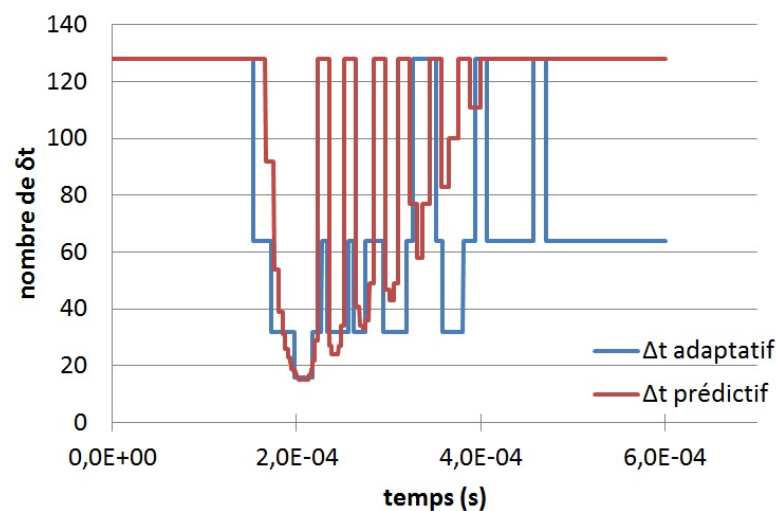


FIGURE 12.11 – Evolution de la taille des pas de temps Δt , selon deux techniques d'adaptation du pas de temps, pendant le transitoire couplé de Godiva, et avec l'approche IQM.

Il y a cependant quelques différences dans les pas de temps sélectionnés par les deux stratégies. La méthode prédictive n'est pas limitée à un nombre de pas de temps δt contenus par Δt en puissance de deux, ce qui permet une adaptation plus fine aux minimums. On note également des pas de temps sensiblement plus grands que la méthode adaptative aux extremums et à la fin du transitoire. Cette différence est due au caractère oscillant de la réactivité. L'écart entre valeur courante et valeur de début de pas de temps n'est pas assez grand pour provoquer un calcul de forme dans la méthode prédictive, mais cause une erreur cumulée vue par la méthode adaptative. Définir un critère basée sur une intégrale de l'écart de réactivité pour la méthode prédictive pourrait se révéler plus pertinent ou compléter la méthode.

En guise de perspective : réalisation d'un couplage intriqué

Ce chapitre est relativement indépendant du reste de cette partie de thèse. Il peut être vu comme une ouverture vers les techniques de couplage intriquées, déjà introduites section 5.2.

Nous considérons la phénoménologie de l'expérience Godiva : un milieu fissile initialement surcritique se dilate thermiquement jusqu'à étouffer la réaction en chaîne. La méthodologie utilisée est néanmoins différente de ce qui a été fait dans les chapitres précédents. On vise à résoudre les équations de neutronique, thermique et mécanique ensemble, et non plus l'une après l'autre comme précédemment. Nous tâcherons de montrer la faisabilité de ce type de résolution, qui n'a jamais été tenté entre ces disciplines à notre connaissance, et laisserons de côté la question de sa performance.

13.1 Etablissement des équations

13.1.1 Modèles couplés

Nous adoptons ici, pour chaque discipline, une modélisation qui ramène le problème à un système linéaire. Nous nous plaçons donc dans le formalisme des éléments finis (présenté section 8.1), et supposons que les disciplines couplées partagent les mêmes types d'éléments finis. Les fonctions élémentaires seront donc notées par la suite de la même façon : ξ_i . Nous noterons $\underline{\xi}_i$ en mécanique pour se souvenir que le déplacement élémentaire a une composante par dimension d'espace. De manière générale, on reprend, pour les variables mécaniques, la notation de la section 11.4 qui consiste à indiquer par le nombre de soulignements la dimension des tenseurs.

Nous adoptons l'hypothèse des petites déformations pour la mécanique et la thermique. Cela signifie que ces disciplines sont résolues sur la configuration dite de référence, non déformée, que l'on notera Ω_0 . Il serait plus juste d'utiliser la configuration courante, notée Ω , mais on s'attend à ce que les déformations soient trop faibles pour avoir un impact notable sur ces équations. De fait, nous avons par exemple trouvé une déformation très faible sur Godiva (voir tableau 12.1). En revanche, nous n'utilisons pas cette hypothèse en neutronique, puisque nous cherchons à y voir l'impact de la mécanique. Malgré la faible déformation, on s'attend, à cause de la grande sensibilité de la neutronique, à un effet important.

a. Mécanique

Pour la mécanique, on simplifie (11.18) en prenant l'hypothèse quasi-statique : on ignore les termes avec des dérivées en temps pour se ramener au système linéaire (U est le vecteur des composantes du déplacement \underline{u} sur les vecteurs de base $\underline{\xi}_i$) :

$$KU = F. \quad (13.1)$$

On rappelle les expressions de K et de F , où $\underline{b}_i = \frac{1}{2} \left(\underline{\nabla \xi}_i + \underline{\nabla \xi}_i^t \right)$:

$$\begin{aligned} - (K)_{ij} &= \int_{\Omega_0} \left(\lambda \text{Tr}(\underline{b}_i) \text{Tr}(\underline{b}_j) + 2\mu \text{Tr}(\underline{b}_i \cdot \underline{b}_j) \right) d\Omega_0, \\ - (F)_i &= \int_{\Omega_0} 3\kappa\alpha(T - T_0) \text{Tr}(\underline{b}_i) d\Omega_0. \end{aligned}$$

Notons qu'il est tout à fait possible de mettre sous la forme d'un système linéaire en la déformation le schéma de Newmark utilisé pour traiter la mécanique cinétique section 11.4. Il serait donc possible de lever l'hypothèse quasi-statique ici tout en conservant la même démarche. Nous ne l'avons pas fait pour alléger les équations et se concentrer sur ce qui nous intéressait, le couplage.

b. Thermique

Pour la thermique, partant de (11.14), on peut se ramener au système linéaire suivant :

$$A_{th} \mathcal{T}(\Delta t) = B_{th},$$

avec \mathcal{T} le vecteur des composantes de la température T sur les vecteurs de base ξ_i et (on a pris $\theta = 1$) :

$$\begin{aligned} - (A_{th})_{ij} &= \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega_0} \rho C_p \xi_i \xi_j d\Omega_0 + \int_{\Omega_0} \lambda \nabla \xi_i \nabla \xi_j d\Omega_0, \\ - (B_{th})_i &= \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega_0} \rho C_p \left(\sum_j \mathcal{T}_j(0) \xi_j \right) \xi_i d\Omega_0 + \int_{\Omega_0} P \xi_i d\Omega_0. \end{aligned}$$

c. Neutronique

En neutronique, nous utilisons le modèle de diffusion pour clarifier le propos et éviter la multiplication du nombre de groupes effectifs par le SPN. Nous avons déjà mis les équations cinétiques de la diffusion sous la forme d'un système linéaire pour leur résolution dans CAST3M (8.15) :

$$A_{total} \Phi(\Delta t) = S_{total}.$$

Il serait long de rappeler ici les expressions exactes de A_{total} et S_{total} . Rappelons simplement qu'elles contiennent une matrice de type rigidité, que l'on va noter K_{ne} , et des matrices de type masse, que l'on va noter R lorsque une section efficace intervient dans sa définition et M sinon. On a les expressions générales suivantes pour K_{ne} , R et M :

$$\begin{aligned}
- (K_{ne})_{ij}^g &= \int_{\Omega} D^g \underline{\nabla} \xi_i \cdot \underline{\nabla} \xi_j d\Omega, \\
- (R)_{ij} &= \int_{\Omega} \sigma \xi_i \xi_j d\Omega, \\
- (M)_{ij} &= \int_{\Omega} \xi_i \xi_j d\Omega.
\end{aligned}$$

Rappelons que contrairement à la mécanique et la thermique, ces intégrales sont définies sur Ω , la configuration courante, qui est déformée par la mécanique, et non sur Ω_0 la configuration de référence.

On néglige l'effet Doppler, comme pour l'expérience Godiva. Il n'y a donc pas de dépendance directe à la température.

13.1.2 Algorithme du point fixe

En nommant X le vecteur qui concatène les vecteurs des composantes du déplacement, de la température et du flux neutronique, on définit le système global :

$$A(X)X = B(X). \quad (13.2)$$

$A(X)$ est la matrice diagonale par blocs où chaque bloc correspond à la matrice du système linéaire d'une discipline :

$$A(X) = \begin{pmatrix} K & 0 & 0 \\ 0 & A_{th} & 0 \\ 0 & 0 & A_{total} \end{pmatrix}.$$

$B(X)$ est la concaténation des seconds membres. On a noté explicitement les dépendances de A et B en X pour ne pas tromper sur la nature du système ainsi posé : il est faussement linéaire, chaque discipline incorporant des termes dépendants des autres disciplines.

On choisit un schéma en temps aussi implicite que possible, ce qui rend le système à résoudre à chaque pas de temps véritablement non linéaire.

La manière la plus basique de résoudre (13.2) consiste à utiliser un algorithme de point fixe, similaire à la méthode de Gauss-Seidel présentée section 3.2. En se donnant une estimation initiale X^0 des variables, on définit une estimation de la solution X à l'itération $n + 1$ ainsi :

$$X^{n+1} = A(X^n)^{-1} B(X^n). \quad (13.3)$$

On itère jusqu'à ce que la norme du résidu $F(X^n) = A(X^n)X^n - B(X^n)$ soit suffisamment petite.

Défini ainsi, avec une matrice A diagonale par blocs, cet algorithme revient à résoudre les disciplines indépendamment les unes des autres, ce qui est équivalent à l'algorithme de Jacobi présenté section 3.2.7. Il est moins efficace que l'algorithme de Gauss-Seidel basique (où les disciplines sont résolues l'une après l'autre).

Cependant, puisqu'on définit un système global, il est possible de faire mieux que de simplement juxtaposer les problèmes monodisciplinaires. Les seconds membres de mécanique et de thermique ont des dépendances linéaires, respectivement en la thermique et la neutronique, ce qui permet de les inclure dans le système linéaire multiphysique.

a. Mécanique

Pour le second membre mécanique, en injectant la décomposition de la température sur les ξ_i dans la définition de F on obtient :

$$(F)_i = \sum_j \underbrace{\int_{\Omega_0} 3\kappa\alpha\xi_j \text{Tr}(\underline{b}_i) d\Omega_0}_{-(C_{TM})_{ij}} \mathcal{T}_j - \underbrace{\int_{\Omega_0} 3\kappa\alpha T_0 \text{Tr}(\underline{b}_i) d\Omega_0}_{(F')_i}, \quad (13.4)$$

$$(C_{TM})_{ij} = - \int_{\Omega_0} 3\kappa\alpha\xi_j \text{Tr}(\underline{b}_i) d\Omega_0.$$

On a alors :

$$F = -C_{TM}\mathcal{T} + F',$$

avec C_{TM} la matrice donnant l'impact de la thermique sur la mécanique et F' le nouveau second membre mécanique.

b. Thermique

Le même type d'écriture est possible en thermique. La puissance neutronique locale dégagée par le groupe d'énergie g est le produit du flux neutronique ϕ^g avec une caractéristique scalaire du milieu K^g . En décomposant le flux sur la base des éléments finis on obtient (ϕ_i^g sont les composantes de ϕ^g sur les ξ_i) :

$$(B_{th})_i = \underbrace{\frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega_0} \rho C_p \left(\sum_j \mathcal{T}_j(0) \xi_j \right) \xi_i d\Omega_0}_{(B_{th})'_i} + \sum_{g,j} \underbrace{\int_{\Omega_0} K^g \xi_j \xi_i d\Omega_0}_{-(C_{NT})_{ij}^g} \phi_j^g, \quad (13.5)$$

$$(C_{NT})_{ij}^g = - \int_{\Omega_0} K^g \xi_j \xi_i d\Omega_0.$$

On a donc :

$$B_{th} = -C_{NT}\Phi + B'_{th},$$

avec C_{NT} la matrice donnant l'impact de la neutronique sur la thermique et B'_{th} un nouveau second membre thermique.

c. Neutronique

Le second membre de la neutronique n'a pas de dépendance linéaire simple en la mécanique (l'effet Doppler étant négligé, il n'y a pas d'impact direct de la thermique). On ne cherche donc pas à l'explicitier ici.

d. Problème global

On peut alors définir un nouveau système global :

$$A'(X)X = B'(X), \quad (13.6)$$

où B' concatène les nouveaux seconds membres et où $A'(X)$ intègre les matrices C_{TM} et C_{NT} :

$$A'(X) = \begin{pmatrix} K & C_{TM} & 0 \\ 0 & A_{th} & C_{NT} \\ 0 & 0 & A_{total} \end{pmatrix}.$$

Partant du système (13.6), l'algorithme itératif défini par (13.3) prend cette fois en compte dans le système linéaire l'influence de la neutronique sur la thermique et celle de la thermique sur la mécanique. Ces termes étant exactement linéaires, ils sont traités sans approximation.

Cependant, on ne prend pas en compte l'influence des autres disciplines sur la neutronique. La solution neutronique est donc la même que celle obtenue par un solveur neutronique indépendant. On n'a pas non plus d'impact direct de la mécanique sur la thermique. Une fois le flux neutronique établi, la thermique peut se déduire indépendamment de la mécanique. Ainsi le fait que la matrice A' soit triangulaire par blocs nous amène à retrouver l'algorithme de Gauss-Seidel (présenté section 3.2), où les disciplines sont résolues indépendamment les unes des autres, mais où les solutions des premières alimentent les suivantes.

Ainsi, bien qu'on ait posé un problème intriqué, on n'a encore rien gagné par rapport à une résolution séquentielle du couplage.

13.1.3 Algorithme de Newton

On peut également résoudre le problème global avec l'algorithme de Newton introduit section 3.3. Il devrait permettre cette fois de prendre en compte l'influence de la mécanique sur la neutronique dans le système linéaire. Repartons de (13.2). On commence par définir un résidu dont on va minimiser la norme :

$$F(X) = A(X)X - B(X).$$

L'algorithme de Newton passe par le calcul de la jacobienne de F en X , notée J_X :

$$(J_X)_{ij} = \frac{(\partial A(X)X)_i}{\partial X_j} - \frac{\partial B_i}{\partial X_j} = \sum_k \frac{\partial A_{ik}}{\partial X_j} X_k + A_{ij} - \frac{\partial B_i}{\partial X_j}. \quad (13.7)$$

Pour construire la jacobienne, il est donc nécessaire d'évaluer la dérivée de chaque terme de la matrice $A(X)$ et du second membre $B(X)$ à l'estimation de X obtenue à l'itération précédente de l'algorithme.

a. Mécanique

Puisque nous utilisons l'hypothèse des petites déformations, le domaine Ω_0 est constant, et la matrice K elle-même ne varie pas. En revanche, F dépend de la température.

Si on injecte la décomposition de T sur la base des éléments finis on obtient :

$$(F)_i = \int_{\Omega_0} 3\kappa\alpha \left(\sum_k \mathcal{T}_k \xi_k - T_0 \right) Tr(\underline{b}_i) d\Omega_0.$$

En dérivant cette expression par rapport aux composantes de \mathcal{T} on obtient le résultat qui nous intéressait (d'après (13.7)) :

$$\frac{\partial(F)_i}{\partial \mathcal{T}_j} = \int_{\Omega_0} 3\kappa\alpha \xi_j Tr(\underline{b}_i) d\Omega_0. \quad (13.8)$$

b. Thermique

Comme pour la mécanique, l'hypothèse des petites déformations implique que la matrice A_{th} est constante. Seul le second membre B_{th} est susceptible d'évoluer, à cause de sa dépendance à la puissance neutronique.

Notons P_{th} le terme de B_{th} qui dépend de la puissance P . L'autre terme de B_{th} doit être réévalué à chaque pas de temps mais est fixé pendant sa résolution. En décomposant le flux sur la base des éléments finis on obtient :

$$(P_{th})_i = \int_{\Omega_0} \left(\sum_g K^g \sum_k \phi_k^g \xi_k \right) \xi_i d\Omega_0.$$

Puis en dérivant cette expression par rapport à ϕ_k^g on arrive à :

$$\frac{\partial(P_{th})_i}{\partial \phi_j^g} = \int_{\Omega_0} K^g \xi_j \xi_i d\Omega_0. \quad (13.9)$$

c. Neutronique

Contrairement aux autres disciplines, on ne se place pas dans l'hypothèse des petites déformations en neutronique. Les intégrales sont donc définies sur un domaine Ω courant, dépendant de la déformation mécanique. On les ramène dans ce qui suit à la configuration trouvée à l'issue de l'itération précédente de l'algorithme de Newton, configuration que l'on note Ω_p et qui est supposée connue. Cela permet d'explicitier la dépendance des termes neutroniques aux variables mécaniques.

On introduit le changement de variable suivant, qui à $\underline{y} \in \Omega_p (\subset \mathbb{R}^d, \text{ avec } d = 1, 2, \text{ ou } 3)$ associe $\underline{x} \in \Omega$:

$$\underline{x} = \underline{y} + \underline{u}'(\underline{y}) = (\underline{Id} + \underline{u}')(y). \quad (13.10)$$

Le \underline{u}' intervenant dans (13.10) peut s'écrire ainsi :

$$\underline{u}' = \underline{u} - \underline{u}_p. \quad (13.11)$$

avec \underline{u} le déplacement de Ω_0 vers Ω et \underline{u}_p celui de Ω_0 vers Ω_p . \underline{u} correspond au déplacement mécanique, introduit dans la section 11.4, et solution de (13.1). \underline{u}_p est supposé connu.

Soit f une fonction de Ω . On note \bar{f} la fonction "ramenée" sur Ω_p :

$$\bar{f}(\underline{y}) = f \circ (\underline{Id} + \underline{u}')(\underline{y}) = f(\underline{x}).$$

Deux types d'intégrales interviennent dans la définition du système linéaire de la neutronique. Pour les matrices de type masse, il est simplement nécessaire de prendre en compte la variation du volume élémentaire : $d\Omega = |\det(\nabla(\underline{Id} + \underline{u}'))|d\Omega_p$. Ce résultat, très classique, peut être trouvé dans [67] par exemple. Par la suite nous omettrons la valeur absolue. Un déplacement cinématiquement admissible (notion définie section 11.4) assure que le déterminant est toujours positif, et nous supposons que les déplacements considérés sont suffisamment petits pour que cette propriété reste vraie même avec des déplacements interpolés (par l'algorithme de Newton). On a donc pour toute fonction f suffisamment régulière :

$$\int_{\Omega} f \xi_i \xi_j d\Omega = \int_{\Omega_p} \bar{f} \bar{\xi}_i \bar{\xi}_j \det(\underline{Id} + \nabla \underline{u}') d\Omega_p. \quad (13.12)$$

Pour les matrices de type rigidité, il est nécessaire de prendre en compte l'effet du changement de variable (13.10) sur le calcul des gradients des fonctions élémentaires. On a $\forall f, g$ suffisamment régulières :

$$\begin{aligned} \nabla(f \circ g) &= \left(\frac{\partial}{\partial x_i} (f \circ g) \right)_i \\ &= \left(\sum_j \frac{\partial f}{\partial x_j} \circ g \frac{\partial g_j}{\partial x_i} \right)_i \\ &= (\nabla g)^t (\nabla f) \circ g. \end{aligned}$$

Ainsi, en notant ∇_p le gradient défini sur Ω_p , on a : $\nabla \xi_i \circ (\underline{Id} + \underline{u}') = (\underline{Id} + \nabla \underline{u}')^{-t} \nabla_p \bar{\xi}_i$.

En outre, en notant \cdot le produit scalaire, on a $\forall \underline{A}, \underline{X}, \underline{Y}$:

$$\underline{AX} \cdot \underline{AY} = \underline{X}^t \underline{A}^t \underline{AY} = (\underline{A}^t \underline{AX}) \cdot \underline{Y}.$$

On peut donc écrire finalement $\forall f$ suffisamment régulière :

$$\int_{\Omega} f \nabla \xi_i \cdot \nabla \xi_j d\Omega = \int_{\Omega_p} \bar{f} (\underline{Id} + \nabla \underline{u}')^{-1} (\underline{Id} + \nabla \underline{u}')^{-t} \nabla_p \bar{\xi}_i \cdot \nabla_p \bar{\xi}_j \det(\underline{Id} + \nabla \underline{u}') d\Omega_p. \quad (13.13)$$

De plus, les sections efficaces doivent être adaptées lorsque la géométrie est modifiée pour maintenir les bilans matériels sous-jacents (une section efficace macroscopique est le produit

d'une section efficace microscopique, supposée ici constante, avec une concentration atomique, voir équation (1.2)). Cela revient à écrire ($\forall \Omega' \subset \Omega$ associé à Ω'_p par le déplacement \underline{u}'), avec σ_p les sections efficaces sur la configuration Ω_p , et σ celles sur Ω , après adaptation pour maintenir les bilans matériels :

$$\int_{\Omega'} \sigma d\Omega' = \int_{\Omega'_p} \bar{\sigma} \det(\underline{Id} + \underline{\nabla u}') d\Omega'_p = \int_{\Omega'_p} \sigma_p d\Omega'_p.$$

On en déduit :

$$\bar{\sigma} \det(\underline{Id} + \underline{\nabla u}') = \sigma_p. \quad (13.14)$$

Le changement de géométrie et l'adaptation des sections efficaces se compensent donc parfaitement pour les termes de type (13.12) où f est une section efficace.

A l'inverse, les coefficients de diffusion neutroniques sont souvent en $\frac{1}{\sigma_t}$ (on a par exemple montré la formule (C.25) dans le cas du SPN). On utilise cette hypothèse de modélisation dans la thèse (voir section 1.4). (13.14) implique alors :

$$\bar{D}^g = \det(\underline{Id} + \underline{\nabla u}') D_p^g.$$

Le changement de géométrie et l'adaptation du coefficient de diffusion conduisent donc à mettre au carré le déterminant intervenant dans (13.13) lorsque f est un coefficient de diffusion. Ce résultat est très spécifique à la neutronique, où le flux neutronique diffuse d'autant plus facilement qu'il y a peu de noyaux avec lesquels les neutrons interagissent. On ne retrouverait pas ce type de résultat en thermique par exemple, où le vide est au contraire plutôt un obstacle à la diffusion de la chaleur.

Pour calculer les dérivées partielles, on va commencer par exprimer (13.13) au premier ordre en $\underline{\nabla u}'$. On admet les formules classiques :

$$\begin{aligned} \det(\underline{Id} + \underline{\nabla u}') &= 1 + \text{Tr}(\underline{\nabla u}') + o(\underline{\nabla u}') \\ (\underline{Id} + \underline{\nabla u}')^{-1} &= \underline{Id} - \underline{\nabla u}' + o(\underline{\nabla u}') \end{aligned}$$

On obtient donc finalement pour les différents types de termes intervenant dans la définition du problème neutronique :

$$\begin{aligned} (K_{ne})_{ij}^g &= \int_{\Omega} D^g \underline{\nabla \xi}_i \cdot \underline{\nabla \xi}_j d\Omega \approx \int_{\Omega_p} D_p^g \left(\underline{Id}(1 + 2\text{Tr}(\underline{\nabla u}')) - \underline{\nabla u}' - \underline{\nabla u}'^t \right) \underline{\nabla}_p \bar{\xi}_i \cdot \underline{\nabla}_p \bar{\xi}_j d\Omega_p, \\ (R)_{ij} &= \int_{\Omega} \sigma \xi_i \xi_j d\Omega = \int_{\Omega_p} \sigma_p \bar{\xi}_i \bar{\xi}_j d\Omega_p. \\ (M)_{ij} &= \int_{\Omega} \xi_i \xi_j d\Omega \approx \int_{\Omega_p} \bar{\xi}_i \bar{\xi}_j (1 + \text{Tr}(\underline{\nabla u}')) d\Omega_p. \end{aligned}$$

Introduisons le tenseur de déformation $\underline{\epsilon}' = \frac{1}{2} (\underline{\nabla u}' + \underline{\nabla u}'^t)$ et les déformations \underline{b}_i associées aux déplacements élémentaires $\underline{\xi}_i$. Par linéarité de l'opérateur qui associe déformation

à déplacement, on a $\underline{\epsilon}' = \sum_i u'_i \underline{b}_i$ où les u'_i sont les coordonnées du déplacement \underline{u}' sur la base des $\underline{\xi}_i$. D'après (13.11), on a $u'_i = u_i - (u_i)_p$, avec u_i les coordonnées de \underline{u} (soit le vecteur U de (13.1)), et $(u_i)_p$ celles de \underline{u}_p .

En exprimant les termes précédents en déformation on peut obtenir ainsi leurs dérivées par rapport aux u_i , en \underline{u}_p :

$$\frac{\partial(K_{ne})_{ij}^g}{\partial u_k}(\underline{u}_p) = \int_{\Omega_p} 2D_p^g(Tr(\underline{b}_k)\underline{Id} - \underline{b}_k)\nabla_p \bar{\xi}_i \cdot \nabla_p \bar{\xi}_j d\Omega_p, \quad (13.15)$$

$$\frac{\partial(M)_{ij}}{\partial u_k}(\underline{u}_p) = \int_{\Omega_p} \bar{\xi}_i \bar{\xi}_j Tr(\underline{b}_k) d\Omega_p. \quad (13.16)$$

En examinant les définitions (8.16) et (8.17) des blocs constituant le système neutronique global (8.15), on arrive, avec les notations de la section 8.3.2, $\theta = 1$, et les termes définis par (13.15) et (13.16), à :

$$\frac{\partial(A^{g' \rightarrow g})_{ij}}{\partial u_k} = \delta_{g,g'} \left(\frac{1}{V^g \Delta t} \frac{\partial(M)_{ij}}{\partial u_k} + \frac{\partial(K_{ne})_{ij}^g}{\partial u_k} \right), \quad (13.17)$$

$$\frac{\partial(S^g)_i}{\partial u_k} = \frac{1}{V^g \Delta t} \sum_j \frac{\partial(M)_{ij}}{\partial u_k} \phi_j^g(0) + \sum_l e^{-\lambda_l \Delta t} \frac{\partial(P^{l \rightarrow g} C^l(0))_{ij}}{\partial u_k}. \quad (13.18)$$

De la même façon que les sections efficaces sont adaptées pour maintenir des bilans de masses, les concentrations en précurseurs sont également adaptées lorsque la géométrie est modifiée. Cela revient à annuler le second terme de (13.18). Il reste donc :

$$\frac{\partial(S^g)_i}{\partial u_k} = \frac{1}{V^g \Delta t} \sum_j \frac{\partial(M)_{ij}}{\partial u_k} \phi_j^g(0). \quad (13.19)$$

Notons que nous ne modifions pas $\phi_j^g(0)$ lorsque la géométrie est déformée. Cette hypothèse a été adoptée pendant tout le travail de thèse et est débattue aux sections 8.4.2 et 11.1.3.

d. Problème global

Le terme en $-\frac{\partial B_i}{\partial X_j}$ de l'expression de la jacobienne (13.7), explicité par (13.8) et (13.9) pour la mécanique et la thermique, conduit à réintroduire les matrices C_{TM} et C_{NT} , définies par (13.4) et (13.5), dans la jacobienne. On retrouve donc la même jacobienne, que l'on parte de (13.2) ou de (13.6). C'est tout à fait normal, la linéarisation faite pour l'algorithme de Newton retrouve ici des termes linéaires.

L'intérêt de l'algorithme de Newton est qu'il donne un cadre mathématique pour la linéarisation des termes plus complexes du second membre, comme ceux de la neutronique (13.19) qui n'avaient pas été obtenus section 13.1.2. On prend également en compte les variations des termes de la matrice, ce que le point fixe est incapable de faire.

On appelle C_{MN}^S la matrice qui, définie à partir de (13.19) et (13.16), donne l'influence de la mécanique sur le second membre neutronique :

$$(C_{MN}^S)_{ij}^{g' \rightarrow g} = -\delta_{g,g'} \frac{1}{V^g \Delta t} \sum_k \int_{\Omega_p} \bar{\xi}_i \bar{\xi}_k Tr(\underline{\underline{b}}_j) d\Omega_p \phi_k^g(0). \quad (13.20)$$

On nomme également C_{MN}^A la matrice, définie à partir de l'expression de la jacobienne (13.7), de (13.17), (13.15) et (13.16) donnant l'influence de la mécanique sur la matrice de neutronique :

$$(C_{MN}^A)_{ij}^{g' \rightarrow g} = \delta_{g,g'} \sum_k \left(\frac{1}{V^g \Delta t} \int_{\Omega_p} \bar{\xi}_i \bar{\xi}_k Tr(\underline{\underline{b}}_j) d\Omega_p + \int_{\Omega_p} 2D_p^g(Tr(\underline{\underline{b}}_j) Id - \underline{\underline{b}}_j) \nabla_p \bar{\xi}_i \cdot \nabla_p \bar{\xi}_k d\Omega_p \right) \phi_k^g(\Delta t). \quad (13.21)$$

Ici $\phi_k^g(\Delta t)$ représente la dernière estimation, par l'algorithme de Newton, des composantes du flux neutronique.

En définissant $C_{MN} = C_{MN}^S + C_{MN}^A$, on arrive à l'expression suivante de la jacobienne globale :

$$J_X = \begin{pmatrix} K & C_{TM} & 0 \\ 0 & A_{th} & C_{NT} \\ C_{MN} & 0 & A_{total} \end{pmatrix}. \quad (13.22)$$

e. Approximations utilisées

Pour des raisons de facilité de mise en œuvre, deux approximations ont été introduites pour le calcul numérique des termes de la jacobienne (13.22), et plus précisément de C_{MN} , dans l'application qui suit.

1. La façon dont le produit de champs représentés par des éléments finis est fait dans CAST3M conduit à :

$$\int_{\Omega_p} \bar{\xi}_i \bar{\xi}_k Tr(\underline{\underline{b}}_j) d\Omega_p \approx \delta_{i,k} \int_{\Omega_p} \bar{\xi}_i Tr(\underline{\underline{b}}_j) d\Omega_p.$$

2. La configuration Ω_p dans la définition des termes de C_{MN} est remplacée par Ω_0 , la configuration de référence, non déformée. Cela simplifie le calcul de la jacobienne et évite d'en recalculer les termes à chaque itération.

Du fait de ces approximations, la convergence de l'algorithme de Newton ne pourra pas être quadratique, comme normalement attendu (voir section 3.3).

13.2 Expérience numérique

13.2.1 Cas considéré

Nous présentons ici une expérience numérique, menée dans CAST3M et basée sur les développements de la section précédente. Elle n'a pas pour objectif de simuler une réalité

physique. On considère un rectangle 2D, homogène, de dimension 10cm sur 8cm. Ses caractéristiques thermomécaniques sont celles de Godiva (tableau 10.1), à l'exception de la capacité thermique qui est multipliée par 10^{-6} pour renforcer le couplage. Les tableaux 13.1 et 13.2 donnent les valeurs des paramètres neutroniques utilisés. Deux groupes d'énergie et un seul groupe de précurseurs sont utilisés. Les sections efficaces sont exprimées à l'aide du barn (symbole b), qui vaut 10^{-24}cm^2 . Les ordres de grandeur sont, très approximativement, ceux de l'expérience Godiva, sauf la vitesse des neutrons qui est réduite de trois ordres de grandeur environ. Cela permet d'augmenter la taille des pas de temps admissibles pour le solveur itératif de la cinétique neutronique présenté section 8.3.

Données	Groupe 1	Groupe 2
Coefficient de diffusion (cm)	1	0.5
Section efficace de disparition (b.cm^{-3})	0.1	0.2
Section efficace de production de neutrons de fission (b.cm^{-3})	0.2	0.5
Spectre de fission stationnaire	0.9	0.1
Section efficace de production d'énergie (J.cm^{-1})	1	1.5
Section efficace de transfert vers groupe 1 (b.cm^{-3})	0	0.01
Section efficace de transfert vers groupe 2 (b.cm^{-3})	0.1	0
Vitesse des neutrons (cm.s^{-1})	2.10^6	5.10^5

TABLEAU 13.1 – Paramètres neutroniques utilisés pour l'expérience numérique de couplage intriqué.

Données	Précurseur 1
Constante de décroissance (s^{-1})	0.311
Proportion de neutrons de fissions émis par le précurseur	5.10^{-3}
Spectre d'émission vers groupe 1	0.8
Spectre d'émission vers groupe 2	0.2

TABLEAU 13.2 – Paramètres des précurseurs de neutrons retardés utilisés pour l'expérience numérique de couplage intriqué.

Le système est maillé en quatre rectangles de même taille. Des éléments finis polynomiaux d'ordre 1 sont utilisés. Le maillage est illustré figure 13.1.

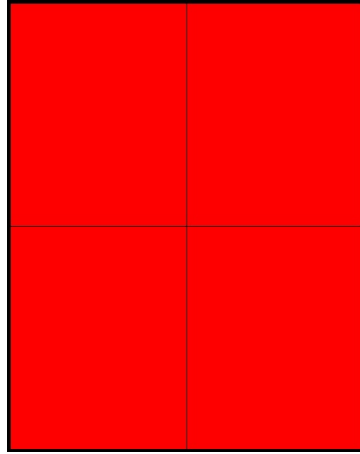


FIGURE 13.1 – Maillage utilisé pour l'expérience numérique de couplage intriqué.

On a pris les conditions aux limites suivantes :

- Flux neutronique et température nuls à la frontière du domaine,
- Déplacements du coin inférieur gauche nuls,
- Déplacement en x du coin supérieur gauche nul.

Le transitoire est initialisé avec :

- Une puissance de 10^4W ;
- Un coefficient multiplicateur de 1.006 (le système est critique prompt).

On ne calcule qu'un seul pas de temps, de 10^{-4}s .

Revenons sur les deux modifications notables des données physiques de Godiva qui ont été faites :

- Capacité thermique multipliée par 10^{-6} et
- Neutrons ralentis de trois ordres de grandeur environ.

Si on utilise la capacité thermique de Godiva (c'est à dire si nous n'appliquons pas le facteur 10^{-6}), la température moyenne de la sphère varie de moins d'un dixième de degré sur le pas de temps considéré. Le couplage est ainsi inexistant et une seule itération de Gauss-Seidel séquentiel classique est nécessaire. On a donc choisi de se rapprocher d'une thermique quasi-statique, pour renforcer le couplage, en réduisant fortement l'inertie thermique du milieu.

Si on utilise les bons ordres de grandeur pour la vitesse des neutrons, le solveur de cinétique neutronique ne converge pas pour le pas de temps considéré. Il est donc nécessaire, pour pouvoir utiliser un pas de temps suffisamment grand pour laisser le temps à la thermique, et donc à la mécanique, de réagir, de considérer des neutrons lents.

Comme annoncé, nous sommes dans le cadre d'une expérimentation numérique qui ne cherche pas à reproduire une réalité physique mais à produire une situation de couplage fort entre les disciplines pour tester la robustesse de la méthode.

13.2.2 Résultats

Les résultats, en terme de puissance globale, température moyenne et déplacement maximum sont donnés figures 13.2, 13.3 et 13.4, en fonction du numéro d'itération, pour différentes techniques de couplage :

- "Newton" : résolution du problème avec l'algorithme de Newton et la jacobienne définie par 13.22.
- "GS intriqué" : résolution du problème mis sous la forme 13.6, par un algorithme itératif.
- "Jacobi" : résolution du problème mis sous la forme 13.2, par un algorithme itératif.
- "GS séquentiel" : utilisation de l'algorithme de Gauss-Seidel avec des solveurs distincts. On résout, à chaque itération, d'abord la neutronique, puis la thermique, et enfin la mécanique.

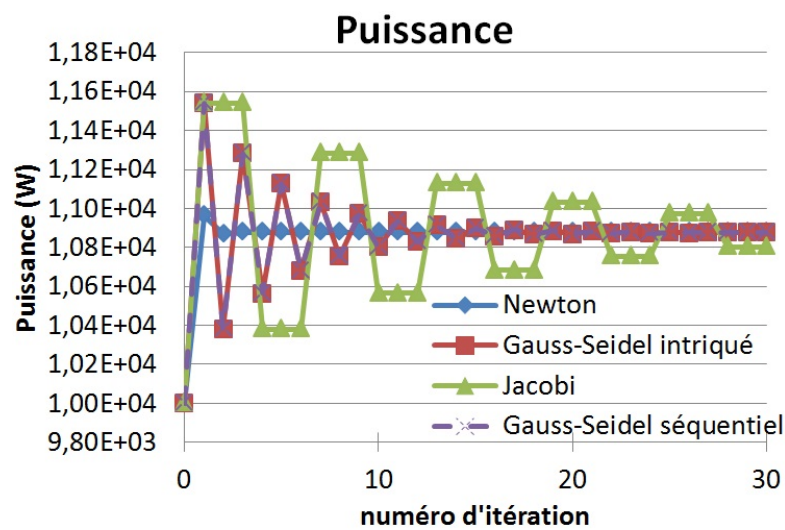


FIGURE 13.2 – Puissance globale obtenue par différentes techniques de couplage lors de l'expérience numérique de couplage intriqué.

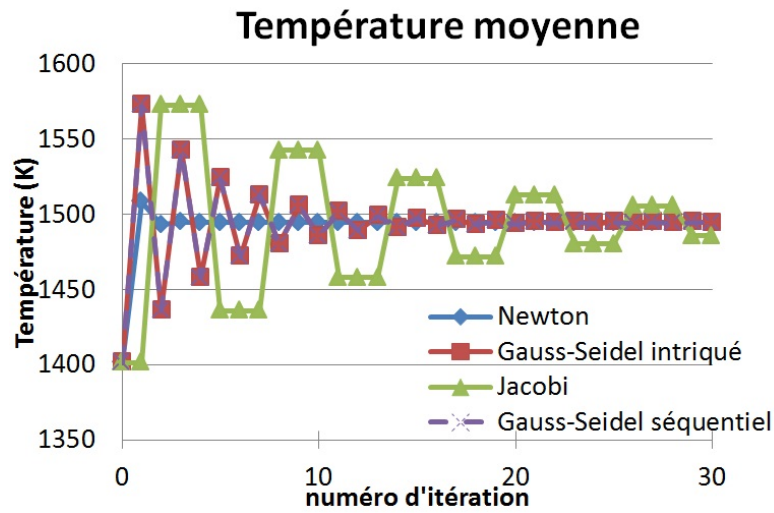


FIGURE 13.3 – Température moyenne obtenue par différentes techniques de couplage lors de l'expérience numérique de couplage intriqué.

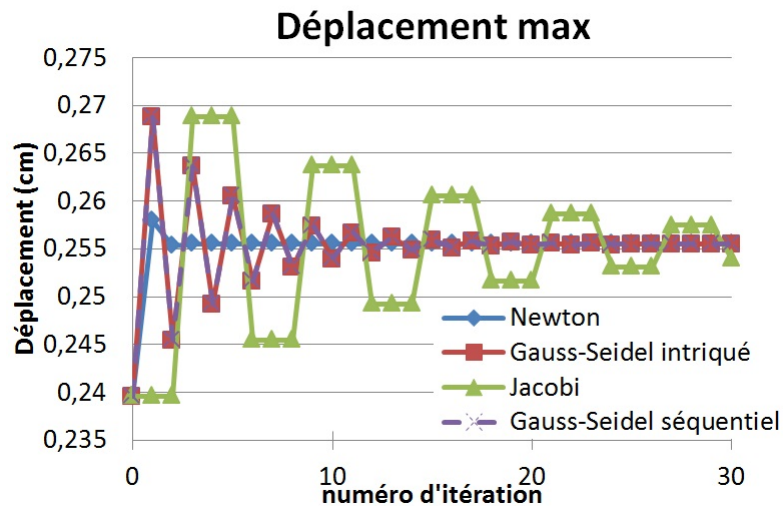


FIGURE 13.4 – Déplacement maximum obtenu par différentes techniques de couplage lors de l'expérience numérique de couplage intriqué.

Premières constatations :

- Tout d'abord "GS intriqué" et "GS séquentiel" sont bien équivalents. Cela est dû à la forme, triangulaire par blocs, de la matrice utilisée par la méthode "GS intriqué".
- La dépendance entre les disciplines étant circulaire, l'algorithme de Jacobi retrouve les mêmes solutions que l'algorithme de Gauss-Seidel, à la différence que chaque discipline est mise à jour alternativement. La convergence prend donc trois fois plus d'itérations.
- Quant à la méthode de Newton, on voit qu'elle est ici bien plus efficace que les autres, et converge en 2 ou 3 itérations seulement.

L'erreur des algorithmes de point fixe (Gauss-Seidel et Jacobi) est, en théorie, majorée par Ak^n , avec n numéro d'itération (voir équation (3.5)). Si on trace le logarithme de l'erreur en fonction du numéro d'itération, on s'attend à obtenir une courbe majorée par une droite (d'équation $\ln(A) + n \ln(k)$). L'erreur de l'algorithme de Newton est, quant à elle, majorée par Ak^{2^n} (on dit que la convergence est quadratique, voir équation (3.7)). En échelle logarithmique, elle devrait donc être majorée par une fonction à décroissance plus rapide qu'une droite. Pour vérifier cela, on a tracé l'écart de la puissance globale à une solution de référence (obtenue après 50 itérations de Newton), pour les différentes techniques de couplage, en échelle logarithmique et en fonction du numéro d'itération figure 13.5.

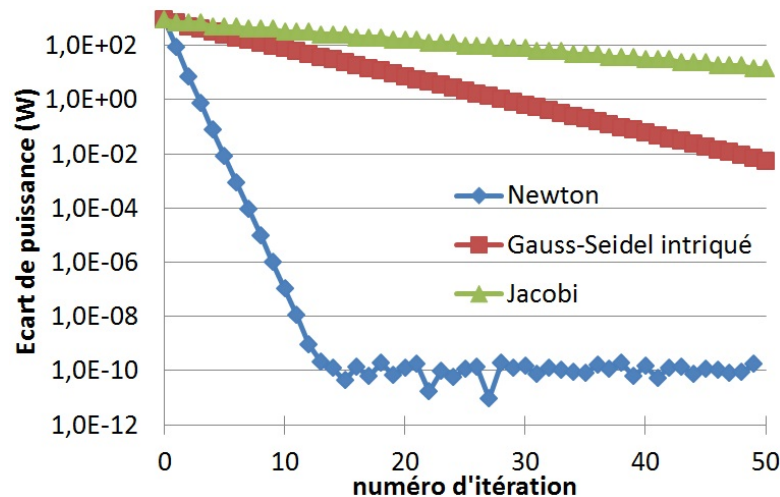


FIGURE 13.5 – Ecart de la puissance globale à une solution de référence pour différentes techniques de couplage, lors de l'expérience numérique de couplage intriqué.

On retrouve bien une majoration de l'erreur par une droite décroissante pour les algorithmes de Gauss-Seidel et de Jacobi, comme la théorie le prévoit. Cependant, on trouve également un comportement linéaire pour l'algorithme de Newton, même si la convergence est bien plus rapide. La convergence quadratique théorique de l'algorithme de Newton est perdue à cause des approximations que l'on a faite dans le calcul de la jacobienne et qui sont listées au paragraphe e. de la section 13.1.3. L'algorithme reste tout de même bien plus performant que les deux autres. Notons que le plateau obtenu, en 13 itérations, à 10^{-10} W de la solution indique simplement que l'on a atteint la limite de précision numérique du solveur.

On peut confirmer la convergence linéaire de l'algorithme de Newton approché que nous avons développé en traçant, en échelle logarithmique, l'erreur à l'itération n en fonction de celle

de l'itération $n - 1$. D'après (3.6) on devrait observer une droite de pente 2. Une droite de pente 1 serait au contraire caractéristique d'une convergence linéaire, comme pour un algorithme de point fixe. Cette courbe est donnée figure 13.6, et elle confirme bien la convergence linéaire de notre algorithme.

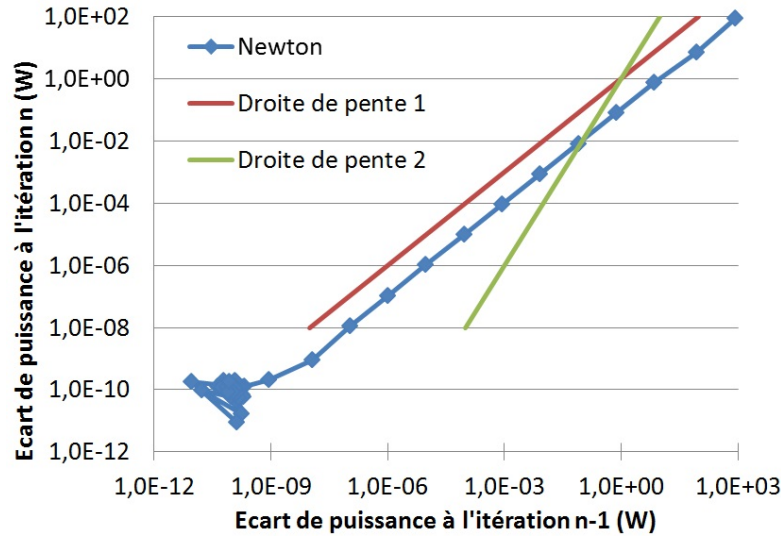


FIGURE 13.6 – Etude de l'ordre de convergence du schéma de Newton développé lors de l'expérience numérique de couplage intriqué.

13.3 Conclusion

En partant des formulations éléments finis d'un problème couplant neutronique, thermique et mécanique, nous avons développé un solveur directement multidisciplinaire. Ce travail a été riche d'enseignements sur ce type d'approche, dite intriquée.

Tout d'abord, il a été l'occasion d'explicitier l'influence de la mécanique sur la neutronique. Il est ainsi apparu que l'effet d'expansion géométrique compense exactement la dilution des sections efficaces macroscopiques pour le calcul des matrices intervenant dans la résolution. Cet effet a grandement simplifié le problème en éliminant les termes couplant les groupes d'énergie entre eux du calcul du bloc "mécanique vers neutronique" (C_{MN}) de la jacobienne. A l'inverse, en adoptant une modélisation classique du coefficient de diffusion, la variation de celui-ci liée à la dilution de la matière se cumule avec l'effet purement géométrique. Ces considérations permettent de mieux comprendre la physique d'un milieu multiplicateur qui change de volume.

Plus généralement, ce travail a permis de mieux comprendre comment un solveur multidisciplinaire pouvait être développé, d'identifier quelques pièges à éviter (principalement la nécessité de prendre en compte les deux sens du couplage pour apporter réellement quelque chose par rapport à l'approche séquentielle), et de démontrer qu'une telle approche est effectivement bien plus efficace dans certains cas.

Gardons en tête qu'il y a d'autres façons de résoudre de manière "intriquée" un couplage. Sur des cas d'application suffisamment simples, une simplification analytique du couplage est

parfois envisageable. Ce n'est pas ce que nous avons fait ici. En revanche, en partant des formulations éléments finis comme nous l'avons fait, on accélère la résolution sans rajouter de contrainte sur le cas d'application considéré.

La démarche suivie ici est simplifiée par le fait que toutes les disciplines couplées sont discrétisées de la même façon, avec la méthode des éléments finis, le même maillage, les mêmes fonctions élémentaires et le même pas de temps. Ainsi les variables échangées sont directement celles utilisées par chaque calcul. En réalité, on adapte souvent les discrétisations à chaque discipline. Il ne faut pas en déduire que l'approche illustrée dans ce chapitre est alors inutilisable. Lorsque les discrétisations diffèrent il y a une étape supplémentaire, assimilable à un changement de variable, pour faire passer les informations d'une discipline à une autre. Il "suffit" de prendre en compte cette transformation dans le calcul de la jacobienne.

Conclusion de la troisième partie

Cette partie de thèse a été consacrée à la simulation du burst de puissance le plus violent réalisé sur Godiva. Ce cas d'application offre un couplage neutronique-thermomécanique à la fois fort, instationnaire et non monotone, ce qui permet de tester la robustesse des méthodes de couplage en transitoire.

Tout d'abord, le solveur de diffusion neutronique développé dans CAST3M et présenté dans la partie précédente a été adapté pour pouvoir traiter le SPN cinétique simulé. Cette évolution a permis d'améliorer la modélisation de l'expérience, et démontre bien la flexibilité offerte par CAST3M. Néanmoins, il s'avère que le SPN est moyennement satisfaisant sur ce cas d'application du fait qu'il approxime la géométrie à un problème plan. Un véritable solveur transport serait nécessaire. Il a été décidé d'avancer tout de même avec cet outil et de se concentrer sur l'étude des techniques de couplage.

La factorisation quasi-statique, sous l'approche IQM, a été utilisée et a prouvé son efficacité pour la réalisation de couplages multiphysiques. En effet, contrairement à la cinétique 3D qui a besoin, indépendamment de tout couplage, de pas de temps fins pour converger, les calculs spatiaux requis par le quasi-statique peuvent être beaucoup plus espacés. De plus, l'algorithme IQM (contrairement au PCQM) est compatible avec de nombreuses techniques de couplage, et nous en avons testées quelques unes ici. La méthode dite de "contre-réaction", inspirée de ce qui se fait déjà dans de nombreux codes de calcul, a été identifiée comme particulièrement efficace. L'approche IQM s'est également révélée adaptée à deux techniques de contrôle du pas de temps, dont celle dite "prédictive", qui conduit à un temps de calcul très compétitif.

L'enseignement principal de cette étude est peut-être l'intérêt du quasi-statique, sous la forme IQM, pour les calculs multi-physiques et sa compatibilité avec des techniques de couplage à la fois simples et efficaces. En particulier, il est tout à fait envisageable d'utiliser cette approche pour coupler un code de calcul possédant son propre solveur de cinétique point avec un code de neutronique.

L'expérience calculée a l'inconvénient de peu déformer la forme du flux neutronique et d'être très peu dépendante des neutrons retardés pour le calcul du pic de puissance. Il serait donc judicieux de considérer d'autres cas d'application pour vérifier l'intérêt du quasi-statique, tel qu'on l'utilise ici, sur des calculs couplés plus exigeants.

En complément de ce travail sur les techniques de couplage séquentielles, une maquette de résolution intriquée du même type de problème, sur un cas simplifié, a été faite. Elle a montré que l'algorithme de Newton, utilisé sur les formulations éléments finis des problèmes couplés, était utilisable et conduisait, dans notre cas, à une convergence bien plus rapide que les algorithmes de type point fixe. Cette façon de construire un solveur intriqué est très générale, puisqu'elle part des problèmes linéaires issus de la discrétisation des différentes équations couplées. Elle est donc utilisable pour d'autres couplages et d'autres cas d'application.

Conclusion générale

Conclusion générale

15.1 Bilan

L'objectif de cette thèse était l'étude des techniques de couplage entre neutronique, thermique et mécanique. Pour tâcher de l'atteindre, nous avons suivi une démarche en trois temps.

Tout d'abord, considérant que le couplage est une problématique qui va bien au-delà des disciplines impliquées dans la thèse, une étude poussée des techniques de couplage existantes dans la littérature a été menée. Elle a constitué la première partie de cette thèse. Une classification des techniques de couplage en deux catégories a été proposée, selon que l'on s'impose d'utiliser des solveurs distincts pour chaque discipline couplée, ce que l'on a appelé couplage séquentiel, ou que l'on s'autorise au contraire à développer un solveur multiphysique, ce que l'on a appelé couplage intriqué. On retrouve par ailleurs les techniques classiques de résolution de problèmes non-linéaires, Gauss-Seidel et Newton en tête, avec leurs nombreuses variantes. Citons en particulier l'accélération d'Anderson pour Gauss-Seidel et le JFNK (Jacobian-Free Newton-Krylov) pour Newton, qui sont toutes deux populaires.

Ensuite, dans l'objectif de réaliser effectivement un couplage entre neutronique, thermique et mécanique, des méthodes de chaînage entre la mécanique et la neutronique ont été développées. Ces disciplines sont rarement calculées ensemble, au point que les codes déterministes de neutronique s'appuient souvent sur des hypothèses de régularité du maillage qui interdisent de le déformer. Calculer l'effet neutronique d'une déformation du cœur est pourtant un enjeu important pour la filière des RNR. Cette question étant en soi un sujet de recherche, nous avons pris le temps de la traiter convenablement dans la deuxième partie de cette thèse et deux approches complémentaires ont été développées :

- En utilisant le code déterministe de référence du CEA, APOLLO3®, une technique de projection de la géométrie déformée sur un maillage de calcul fixe et régulier, dit de pixellisation, a d'abord été étudiée.
- La deuxième approche, développée dans le code de thermomécanique du CEA CAST3M, consiste à déformer maillage de calcul et géométrie en même temps. Pour la mettre en oeuvre, un solveur de diffusion neutronique a été développé dans CAST3M.

Ces deux approches ont été confrontées en stationnaire à une modélisation stochastique portée par un code du CEA, TRIPOLI-4, et comparées entre elles en transitoire. Les cas

utilisés pour ces comparaisons ont été choisis pour leur réalisme et leur intérêt en physique des réacteurs : on a utilisé les essais de gerbage réalisés sur Phénix, les déformations mécaniques étant issues de calculs d'interaction fluide-structure faits avec CAST3M. Les résultats obtenus par les différents codes sont cohérents entre eux, et dans une certaine mesure avec l'expérience, ce qui conforte la validité de nos développements. Une analyse physique du mode de déformation du cœur et de son impact sur la neutronique a également été menée à cette occasion.

Enfin, l'approche à maillage mobile dans CAST3M a été choisie pour mener l'étude sur le couplage, objet de la troisième partie de la thèse. Les solveurs de thermomécanique de CAST3M ont également été utilisés, ce qui a permis de faciliter l'étude du couplage en regroupant dans le même environnement logiciel tous nos outils. L'expérience Godiva, qui présente un couplage à la fois conceptuellement simple et fort, et donc à même de tester la robustesse de nos méthodes, a été choisie comme cas d'application.

Les techniques de couplage séquentielles, entre solveurs distincts, ont d'abord été étudiées. La factorisation quasi-statique, consistant à calculer séparément amplitude et forme du flux, a été introduite. Cette approche nous semble en effet particulièrement adaptée aux calculs multiphysiques puisqu'elle permet de lier étroitement, sur des pas de temps fins, les autres disciplines à une modélisation simplifiée de la neutronique cinétique, dite cinétique point, et de corriger les erreurs dues à cette simplification sur des pas de temps plus grands. Deux algorithmes existent dans la littérature pour l'utilisation de la factorisation quasi-statique, selon que l'amplitude est calculée avant (IQM) ou après (PCQM) la forme. On a montré que l'IQM, contrairement au PCQM, est compatible avec différentes techniques de couplage et d'adaptation de pas de temps et permet donc d'obtenir des temps de calcul très intéressants, sans dégrader la modélisation. Des résultats cohérents avec les mesures expérimentales ont été trouvés.

Sur la même phénoménologie, mais sur un cas d'application simplifié et artificiellement adapté pour renforcer le couplage, l'approche intriquée, consistant à développer un solveur directement multiphysique, a été testée. Notre démarche a consisté en la résolution commune, par l'algorithme de Newton, des systèmes linéaires issus de la méthode des éléments finis appliquée à chacun des problèmes couplés. La faisabilité de cette démarche a été démontrée et, sur le cas d'application choisi, de bien meilleures performances que les techniques de couplage séquentielles ont été exhibées. L'algorithme de Newton a également été confronté à des techniques plus naïves de résolution commune des systèmes linéaires couplés, qui se sont révélées bien moins efficaces.

15.2 Les principaux apports de la thèse

Le travail réalisé lors de cette thèse apporte des éléments de compréhension dans différents domaines.

En physique des RNR-Na déformés tout d'abord, on a vu que :

- Les effets 3D dus à l'inclinaison des assemblages sont négligeables, mais que la modélisation de cette inclinaison peut être source d'erreur comme nous le rappellerons plus bas. Les déformations sont suffisamment faibles pour que seul l'effet de premier ordre, lié au déplacement moyen des matières fissiles, n'intervienne.

- On a également constaté que la sensibilité de l'autoprotection à une déformation du coeur est faible. L'effet dominant semble être le déplacement de matière fissile vers une zone d'importance neutronique différente. Le sodium n'est pas suffisamment modérateur pour que les variations de sa répartition dans le coeur n'impactent sensiblement les calculs d'autoprotection.
- En cinétique, on a pu constater que l'effet du déplacement des précurseurs de neutrons retardés est négligeable. Ils représentent une source de neutrons faible et se déplacent toujours, dans nos calculs, d'une distance inférieure au libre parcours moyen des neutrons.
- Enfin, lorsque le milieu se déforme par dilatation, on a vu que l'effet dominant est l'augmentation du transport des neutrons, qui ont alors moins de chance de rencontrer un noyau.

Concernant les méthodes de calcul de coeurs déformés, on a montré que la méthode de pixellisation donne de bons résultats sur les RNR-Na, même avec des pixels relativement gros. Ils doivent être suffisamment fins pour saisir le déplacement moyen de la matière, mais étant donné la mobilité des neutrons dans ce type de réacteurs, descendre au-delà de quelques centimètres n'est pas indispensable. Dans nos calculs, raffiner le maillage de pixellisation s'est même avéré néfaste car cela augmentait l'impact d'un artefact lié à la représentation de la déformation des assemblages (création de surfaces horizontales). La technique de déformation de maillage s'est également révélée efficace et exempte de la difficulté liée à la gestion de la pixellisation et du grand nombre de mailles qui en découle. Cependant, là encore une mauvaise représentation de la déformation peut fausser les résultats : il est nécessaire de prendre garde au fait qu'augmenter la surface des mailles conduit à augmenter les fuites neutroniques. La modélisation de la déformation des assemblages est ainsi apparue comme un point critique, quelle que soit la méthode de calcul utilisée, pixellisation, maillage déformable ou calcul de Monte Carlo. Il est nécessaire de respecter le déplacement moyen, sans modifier les quantités de matière et sans fausser les surfaces d'échange.

Une autre question récurrente de modélisation pendant cette thèse a été la gestion de l'entraînement du flux neutronique par la déformation de la géométrie en cinétique. Dans les simulations faites jusqu'à présent, le temps est discrétisé en intervalles finis et la déformation est imposée instantanément entre deux pas de temps. La question est de savoir comment gérer le flux neutronique lors de cette déformation. Cet effet a été identifié négligeable dans les cas que nous avons étudiés, ce qui nous a permis d'adopter la solution la plus simple à mettre en œuvre, qui revient à ne pas déplacer le flux lorsqu'on utilise la pixellisation, et à le déplacer avec la technique à maillage mobile. Il n'est cependant pas trivial d'identifier la méthode la plus physiquement juste. Un premier argument en faveur de ne pas déplacer le flux est que les neutrons ne sont pas liés à la matière et n'ont donc pas de raison d'être déplacés avec elle. Cependant, l'hypothèse de la diffusion neutronique suppose justement une forte interaction du flux neutronique avec la matière, et peut justifier que le second entraîne le premier. En outre, supposer qu'il puisse y avoir un effet de décalage entre le mouvement de la géométrie et la déformation du flux neutronique remet en cause une hypothèse à la base de l'équation de Boltzmann dans sa forme classique, qui est que les noyaux ont une vitesse moyenne négligeable par rapport à celle des neutrons. Attention à ne pas confondre cette notion avec l'agitation thermique des noyaux (déplacement à vitesse moyenne nulle) qui est, elle, prise en compte par la dépendance des sections efficaces à la température. C'est ce qui explique l'élargissement des résonances avec la température qui est à la base de l'effet Doppler.

Enfin, sur les techniques de couplage applicables en physique des réacteurs la thèse a également été l'occasion de progrès. En particulier, la factorisation quasi-statique (avec ses variantes qui n'ont pas été toutes analysées ici) est apparue comme la meilleure façon, à notre connaissance, d'utiliser la cinétique spatiale dans des calculs couplés. Rappelons qu'elle n'ajoute pas d'hypothèse de modélisation. L'utilisation de contre-réactions spatiales est possible avec cette approche et permet d'augmenter substantiellement les pas de temps des calculs neutroniques spatiaux en définissant un premier couplage avec une modélisation simplifiée de la neutronique, la cinétique point. Un contrôle du pas de temps est également facile à mettre en place dans ce cadre et permet une gestion optimale du compromis temps de calcul / précision. Cette démarche est transposable à tous couplages impliquant la neutronique, et semble par exemple particulièrement adaptée aux couplages neutronique-thermohydraulique.

Toujours dans la thématique du couplage, l'expérimentation numérique de couplage intriqué, pendant laquelle un algorithme de Newton a été développé à partir des formalismes éléments finis des problèmes couplés, a été concluante. Elle a montré la faisabilité de cette démarche, qui a l'avantage de bénéficier du généralisme des éléments finis. Les développements mathématiques que nous avons faits ne sont ainsi pas liés à un cas d'application, et pourraient conduire au développement d'un outil de couplage neutronique-thermique-mécanique très général. Plus généralement encore, ce travail est une bonne illustration d'une certaine approche du couplage, la résolution commune des équations discrétisées, qui ne dépend pas des disciplines mises en jeu. Dans notre cas, les équations étaient discrétisées de la même façon (mêmes éléments finis par exemple), mais il est tout à fait possible de prendre en compte, dans le calcul de la jacobienne, les changements de variable nécessaires pour passer d'une disciplines à une autre si ce n'est pas le cas.

15.3 Perspectives

La première perspective de ce travail est bien sûr l'utilisation des outils qui ont été développés à des fins d'étude. Le solveur de diffusion neutronique développé dans CAST3M est ainsi déjà utilisé pour l'interprétation des AURN de Phénix [55, 56].

Les outils eux-mêmes sont également susceptibles d'évoluer. On s'est concentré sur les réacteurs à neutrons rapides, qui sont les plus sensibles aux effets de déformations mécaniques. Cependant, la grande taille des cœurs de REP de dernière génération les rend sensibles aux petites perturbations, notamment géométriques, qui commencent donc à y être étudiées [109]. La physique des réacteurs à neutrons rapides, essentiellement le grand libre parcours moyen des neutrons, a facilité le développement des outils de chaînage mécanique-neutronique. La mise au point du même type d'outils pour d'autres filières obligerait donc à reconsidérer les choix qui ont été faits. Ainsi, par exemple, des maillages plus fins pourraient être nécessaires et les effets d'autoprotection pourraient être plus forts et plus difficiles à calculer.

Autre voie d'amélioration possible des outils développés, nous avons utilisé pendant cette thèse (le travail avec le SPN simulé sur Godiva mis à part) l'hypothèse de la diffusion. Elle est pertinente lorsqu'on considère des déformations globales de cœurs comme nous l'avons fait, mais pourrait ne plus convenir dans certaines situations, comme c'était le cas pour Godiva. Lever cette hypothèse et passer au transport pourrait ainsi être nécessaire à certaines études. Ce passage au transport ne remettrait pas en cause les approches utilisées pendant la thèse (sauf peut-être pour le couplage intriqué, le transport ne se résolvant pas par résolution de

systèmes linéaires dans un cadre éléments finis), et pourrait donc se faire en s'appuyant sur le travail déjà réalisé.

L'approche quasi-statique qui est mise en avant dans cette thèse gagnerait, quant à elle, à être testée sur des cas d'application plus exigeants, avec une déformation plus forte de la nappe de puissance. A terme, elle pourrait être mise en œuvre avec des codes métiers, permettant un couplage optimal sans nécessiter le développement et la validation de nouveaux outils. Comme nous l'avons déjà signalé, l'intérêt de l'approche quasi-statique nous semble aller bien au-delà des cas considérés dans la thèse. Elle est potentiellement intéressante pour tout couplage transitoire impliquant la neutronique, notamment les couplages neutronique-thermohydraulique qui sont beaucoup regardés sur les réacteurs à eau.

Enfin, les développements faits dans le cadre de l'expérimentation du couplage intriqué gagneraient à être généralisés. Il serait bénéfique de rechercher, éventuellement sur un autre couplage, des cas d'application plus réalistes que celui qui a été envisagé ici et où cette approche permettrait de gagner en robustesse et en temps de calcul. Des solveurs multidisciplinaires de ce type sont déjà utilisés en dehors de l'ingénierie nucléaire (interaction fluide-structure, météorologie par exemple) et ont fait la preuve de leur pertinence. Il pourrait être bon de s'interroger sur le potentiel de cette approche, éventuellement en support d'un couplage séquentiel, pour traiter les couplages intervenant en physique des réacteurs.

15.4 Discussion sur le couplage

Prenons maintenant un peu de recul sur ce qui a été fait pendant cette thèse, et recherchons y des enseignements généraux sur le couplage. J'utiliserai ici la première personne du singulier pour marquer la subjectivité de mon propos, qui n'a qu'une valeur d'opinion personnelle.

L'amélioration des moyens de calcul rend aujourd'hui accessible la réalisation de calculs best-estimate multiphysiques, et il y a, je pense, une vraie tendance (tentation ?) à aller vers ce type de simulations. Cette évolution est, à mon avis, très positive car elle améliore notre finesse de compréhension des phénomènes en physique des réacteurs, mais surtout parce qu'elle permet de décloisonner des disciplines traitées jusqu'à présent par des logiciels et des personnes différents. Ma thèse est, je crois, un des rares sujets du département qui a permis de regrouper régulièrement des spécialistes de ses trois services, SERMA, SEMT et Service de Thermohydraulique et de Mécanique des Fluides (STMF), dans une même pièce ! Lorsque les gens se parlent peu, j'ai observé une tendance, peut-être parce que l'on n'a pas l'envie ou les moyens de s'investir dans ce qui n'est pas notre domaine, à rechercher des réponses à la fois simples et absolues aux questions que l'on se pose dans les autres disciplines (ainsi qu'une difficulté à remettre en cause ces réponses quand on croit les avoir trouvées). Pourtant, la réponse de n'importe quel spécialiste à n'importe quelle question est souvent "ça dépend" !

Faire tomber cette illusion et rétablir un dialogue entre spécialistes est donc à mon avis un aspect très positif du développement de la thématique du couplage. Cependant, je pense que le couplage risque de faire émerger une autre illusion, celle d'avoir tout compris. Elle peut conduire à rechercher à tout coupler, puis à placer une trop grande confiance en les résultats donnés par ce "super-coupleur". Confiance qui s'explique un peu paradoxalement par le fait que personne n'est spécialiste de l'ensemble des phénomènes traités par la simulation, et n'est donc capable de l'analyser en entier. Il faut pourtant, à mon avis, rester lucide sur au moins

deux points, la question de la Vérification et Validation (V and V) (la vérification s'assure que le code fait bien ce que l'on pense, la validation qu'il est conforme à la réalité) de ces outils, et celle de leurs incertitudes.

Concernant leur V and V, je la conçois à deux niveaux, celui des modèles monophysiques, puis celui de leur couplage. Lorsque le couplage est séquentiel, les deux niveaux de validation peuvent être traités séparément. Ce n'est pas le cas pour un couplage intriqué, ce qui peut rendre sa V and V plus compliquée. Cependant, même dans un couplage séquentiel, ce n'est, à mon sens, pas parce que l'on couple des codes déjà validés par ailleurs que l'on peut se passer de valider le couplage lui-même. Les deux questions classiques de la V and V se posent à la réalisation de calculs couplés : le superviseur qui réalise le couplage est-il développé sans erreur, et la modélisation du couplage est-elle bien faite ? Je pense, en effet, qu'il y a un réel "étage" de modélisation qui se rajoute à celui des modèles couplés. Cet étage de modélisation a fait l'objet de longues discussions pendant ma thèse, à propos de la représentation de la déformation d'un cœur en neutronique, de la nécessité ou non de prendre en compte les effets de spectre, ou encore à propos du déplacement des précurseurs de neutrons retardés. Savoir comment modéliser l'impact d'une discipline A sur une discipline B amène à se poser des questions qui ne sont traitées par aucune des deux disciplines.

Si on va un peu plus loin, je vois une question connexe à celle-ci : un résultat jugé suffisamment précis dans une discipline l'est-il toujours lorsqu'on la couple à une autre ? Par exemple, un calcul cœur en neutronique donne généralement une puissance par assemblage, or des calculs thermohydrauliques fins pourraient être intéressés par le détail des puissances dégagées par les différentes aiguilles de l'assemblage, voire par la répartition de la puissance dans le combustible de chacune des aiguilles [116]. On est donc amené dans ce cas à améliorer la modélisation d'une discipline, non pas pour elle-même, mais pour les besoins d'une autre. S'assurer que ces questions sont bien traitées passe, je pense, par une vraie opération de V and V du couplage. Encore une fois, j'entends par là vérification que le couplage a été développé sans erreur et validation des hypothèses menant aux deux sens de chaînage. Je ne vois en revanche pas, pour ce que j'en ai compris jusqu'à présent, une fois ces points traités, de question supplémentaire liée à la validité de la solution commune.

L'autre point sur lequel je veux mettre en garde quand on réalise un couplage est la maîtrise des incertitudes. En multipliant la complexité des simulations et le nombre de leurs paramètres, on augmente inmanquablement le nombre de sources d'incertitude (ce qui ne veut pas dire, il est vrai, que l'incertitude elle-même augmente), tout en donnant l'impression de faire beaucoup mieux qu'avant. En parallèle, on complexifie l'analyse des résultats, ce qui oblige à faire plus confiance à la simulation. Il ne faut pas oublier, je pense, que la finesse d'un modèle n'est pas nécessairement corrélée à la précision des données qui l'alimentent. Je pense même, que de la même façon qu'on rationalise le nombre de chiffres significatifs de nos résultats numériques pour éviter de donner l'illusion d'une précision qui n'est pas atteinte, il n'est pas sain d'améliorer la modélisation d'une simulation sans s'assurer en même temps que les incertitudes liées aux données sont maîtrisées au moins au même niveau de précision. Sinon il y a un risque, je pense, que ces simulations best-estimate ne servent à rogner les marges au-delà de la précision réelle des simulations, ce qui présente un risque de sûreté. L'amélioration des moyens de calcul doit permettre de faciliter la compréhension des phénomènes, d'éviter de "passer à côté de quelque chose" et de quantifier avec précision les caractéristiques de nos systèmes, mais ne doit pas être un prétexte pour abandonner notre sens physique/critique.

Je finirai par une remarque sur le facteur humain. Je trouve qu'il y a une distinction assez forte, au moins dans l'environnement où j'ai évolué, entre physiciens des réacteurs et numériciens. J'ai eu pourtant la chance de travailler entre les deux mondes, et de m'intéresser à la fois à la résolution numérique d'équations et à l'interprétation physique des résultats que j'avais obtenus ainsi. Ce positionnement m'a, par exemple, permis d'identifier la factorisation quasi-statique comme une méthode de résolution adaptée aux calculs couplés. Je pense que le développement d'outils de couplage a besoin des deux compétences. Il est pour l'instant, en physique des réacteurs, surtout confié aux physiciens qui s'orientent naturellement vers le couplage séquentiel, et donc l'utilisation d'outils qu'ils connaissent déjà, et mettent au point des couplages physiquement justes, mais qui manquent peut-être de la rigueur, de la généralité et de l'efficacité que les mathématiques pourraient leur fournir. La situation est très différente en interaction fluide-structure par exemple, peut-être parce que le couplage y est étudié depuis plus longtemps et a des applications plus variées (nucléaire, aéronautique, biomédical, pétrolier etc.). Il y a donc un besoin de faire travailler ensemble physiciens et numériciens sur cette thématique, voire de pousser à des partages de compétences et à l'émergence de profils mixtes. Cette nécessité doit être vue comme une chance. C'est, à mon sens, le meilleur remède aux dangers liés au couplage que nous avons déjà signalés. Je crois aussi, plus généralement, que ces communautés ne peuvent travailler efficacement qu'en communiquant. Les meilleurs développements sont ceux qui sont guidés par un besoin d'analyse physique, et les meilleures études sont celles qui sont éclairées par un regard critique sur l'outil utilisé.

Modélisation de la déformation de géométrie dans TRIPOLI-4

Nous copions ici la section 6.3, intitulée "Présentation du modèle de déformation 3D pour simulation avec le code TRIPOLI-4", du rapport [60]. Ce modèle, développé par ailleurs, a été utilisé lors de cette thèse pour valider nos développements.

La deuxième étude du gerbage du cœur a été réalisée avec le code neutronique TRIPOLI-4.

Chaque assemblage du cœur est posé dans une chandelle du sommier avec un appui qui permet une rotation limitée par un contact de la partie basse du pied à l'intérieur de la chandelle et interdit les translations horizontales. Ainsi, lorsque le dispositif écarteur pousse sur les plaquettes, les assemblages basculent d'abord comme un corps rigide jusqu'au blocage de la partie basse puis subissent une flexion de solide déformable. Le gerbage entraîne donc une courbure des assemblages hexagonaux.

TRIPOLI-4 ne permettant pas de modéliser des poutres courbes, la déformation des assemblages a été modélisée par une superposition de polyèdres hexagonaux inclinés. Cette simplification dans la représentation de la déformation des éléments du cœur de Phénix peut être source de différences par rapport à la réalité mais, pour un découpage suffisamment petit et compte tenu des courbures très faibles, la modélisation mise en place a été jugée acceptable (cf. Figure A.1).

Dans la pratique, il a été écrit un utilitaire en langage Perl qui génère une géométrie (sous le format natif de TRIPOLI-4) à partir d'un méta jeu de données TRIPOLI-4 et des résultats mécaniques issues du code CAST3M.

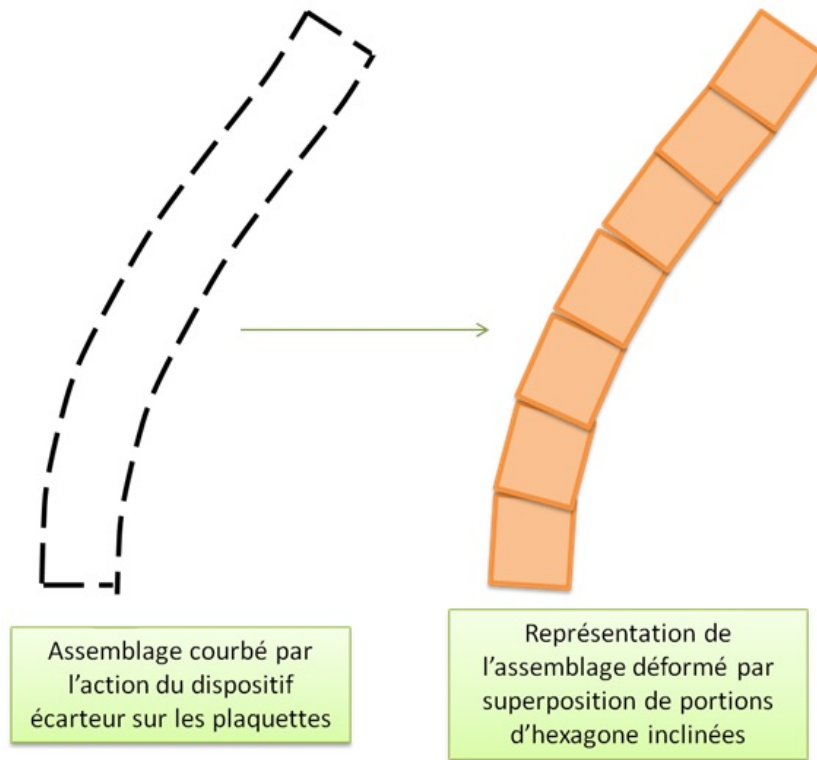


FIGURE A.1 – Schéma de la modélisation des assemblages déformés avec TRIPOLI-4

Pour chacun des scénarios étudiés, CAST3M fournit les déplacements sur l'axe x et y de chaque assemblage à 5 hauteurs différentes : $[0; 0,29; 0,88; 1,48; 2,08; 2,73; 3,45]$ cm. Or, comme il a déjà été présenté, le découpage axial de 14 mailles utilisé pour l'étude neutronique est celui des compositions et les parties basse et haute du cœur ne sont pas considérées. Ainsi, les hauteurs des points qui intéressent pour la mise en place de la géométrie TRIPOLI-4 sont : $[24,2; 49,2; 74,2; 96,635; 107,852; 125,352; 143,852; 155,852; 175,352; 192,852; 213,052; 226,052; 239,052; 264,052, 289,052]$ cm.

Les déplacements sur les nodes du maillage axial 1D « TRIPOLI-4 » sont calculés par MED en interpolant linéairement les déplacements du maillage axial 1D « CAST3M » (cf. Figure A.2).

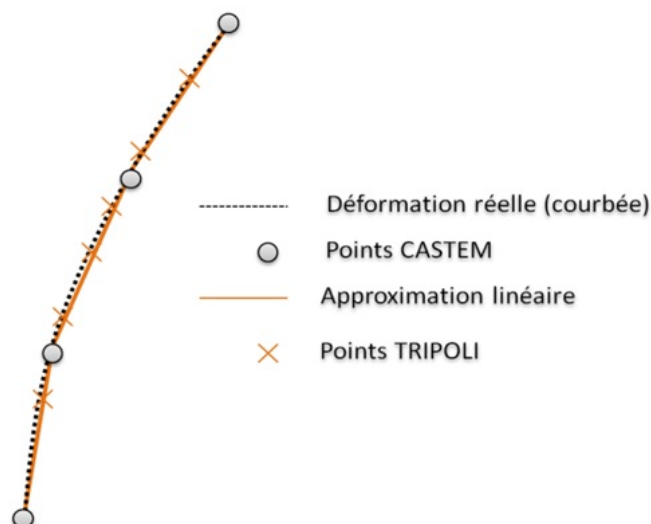


FIGURE A.2 – Principe de l’interpolation entre les résultats de CAST3M et le maillage utilisé dans TRIPOLI-4

L’approximation introduite par l’interpolation linéaire est valide car les écartements, compris entre 1 et 8mm, au niveau des plaquettes sont insignifiants face à la hauteur des assemblages, de plus de 3m50. Leur courbure reste donc très petite et l’évolution du déplacement horizontal entre deux points proches est pratiquement linéaire.

Une fois calculés les déplacements des points du maillage axial étudié et connaissant les positions des assemblages dans le réseau hexagonal non-déformé, on peut obtenir leur position absolue. On crée alors, par rotation, des prismes hexagonaux inclinés ayant ces points pour centre de leurs faces hexagonales. La superposition de ces volumes hexagonaux avec des inclinaisons différentes provoque l’apparition d’espaces artificiels remplis par le sodium dans lequel baigne le cœur ce qui, dans la simulation, augmenterait l’absorption ; et inversement, le chevauchement des portions les unes sur les autres induit une perte de matériau combustible par rapport à la situation nominale. Pour contourner ces problèmes, la solution appliquée dans la génération de la géométrie TRIPOLI-4 est la suivante (cf. Figure A.3) :

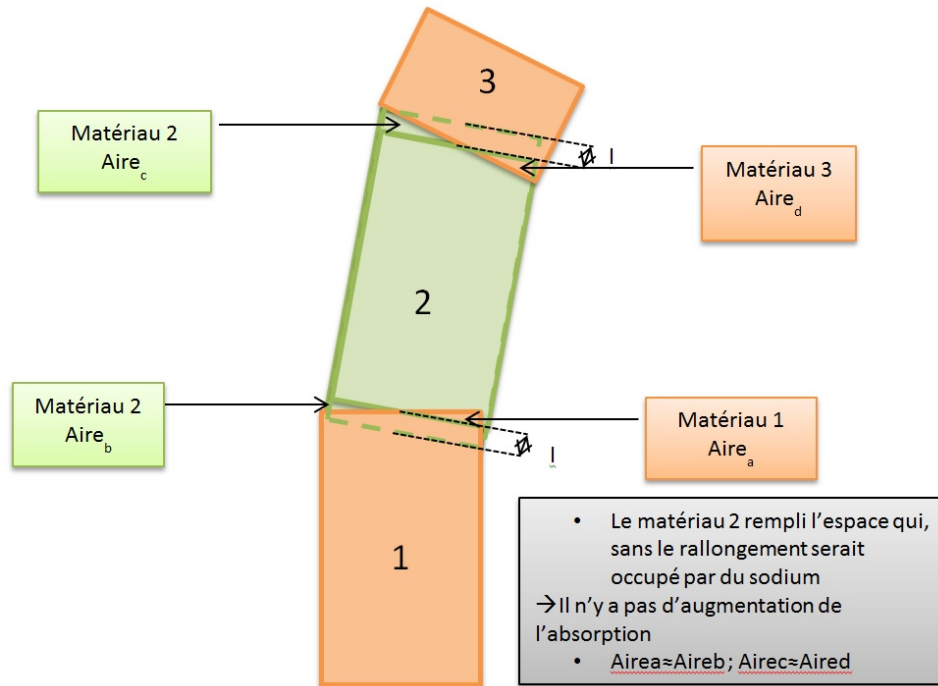


FIGURE A.3 – Schéma de la construction de la géométrie TRIPOLI-4

On numérote de 1 à 14 les portions de chaque assemblage. Les volumes pairs sont rallongés d'une longueur $2xl$, très petite. Ils sont générés avant les volumes impairs qui viendront les écraser en compensant ainsi le bilan de matière et en évitant l'apparition de trous de sodium. Etant donné que le volume supérieur est pair est qu'il est donc plus long que ce qu'il devrait, on écrase la partie en trop avec du sodium. Compte tenu des déformations étudiées, on prend $l=0,002\text{cm}$, longueur suffisamment grande pour remplir le trou de sodium et suffisamment petite pour ne pas ajouter de la matière en trop. Finalement, tous les volumes hexagonaux viennent écraser une grande boîte de sodium. Celle-ci modélise le volume de sodium dans lequel baigne le cœur et remplit les espaces inter-assemblages.

Les compositions associées à tous ces volumes sont reprises des sorties d'APOLLO3® après lecture des ECCOLib correspondant à un calcul ERANOS sans sodium inter-assemblages (elles correspondent aux compositions des assemblages seuls).

Comparaison entre codes d'effets en réactivité de déformations

Nous présentons ici des comparaisons supplémentaires d'effets en réactivité de déformations de cœurs obtenus sur Phénix (compositions évoluées présentées section 6.2) par TRIPOLI-4, APOLLO3® et CAST3M. Ces calculs de validation supplémentaires ont été faits dans le cadre des études sur les AURN [55, 56].

Les calculs mécaniques sont pris en charge par CAST3M, de la même façon que dans la partie II de cette thèse. Quatre types de déformations sont utilisés :

- **Gerbage** : ouverture centrale du cœur obtenue en appliquant des forces au niveau des plaquettes de la 1ère couronne d'assemblages.
- **Compaction** : fermeture du cœur obtenue en imposant des forces au niveau des plaquettes de la 10ème couronne d'assemblages.
- **Injection à la base du cœur** : déformation dynamique obtenue en injectant brutalement du sodium à la base de l'espace inter-assemblage des cinq premières couronnes.
- **Injection ponctuelle** : déformation dynamique obtenue en injectant brutalement du sodium à la base de l'espace inter-assemblage autour de l'assemblage central.

Les résultats sont donnés figures B.1 à B.4. Les résultats de TRIPOLI-4 sont donnés avec des barres d'incertitude à 3σ . Une bonne concordance est trouvée entre les trois codes.

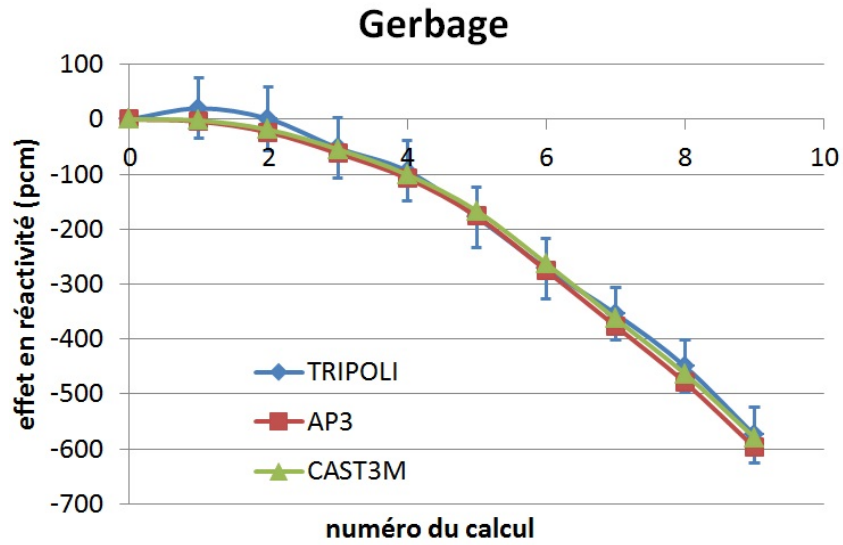


FIGURE B.1 – Effets en réactivité trouvés par TRIPOLI-4, APOLLO3® et CAST3M par gerbage du cœur de Phénix.

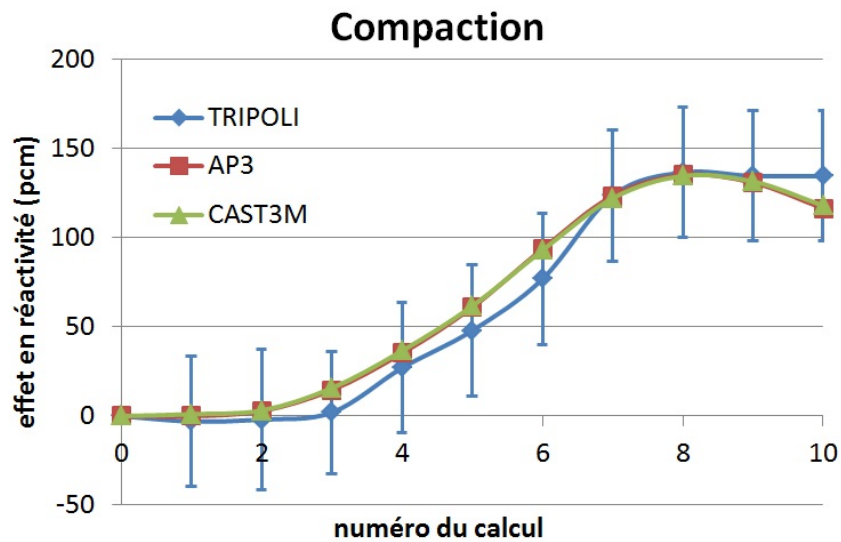


FIGURE B.2 – Effets en réactivité trouvés par TRIPOLI-4, APOLLO3® et CAST3M par compaction du cœur de Phénix.

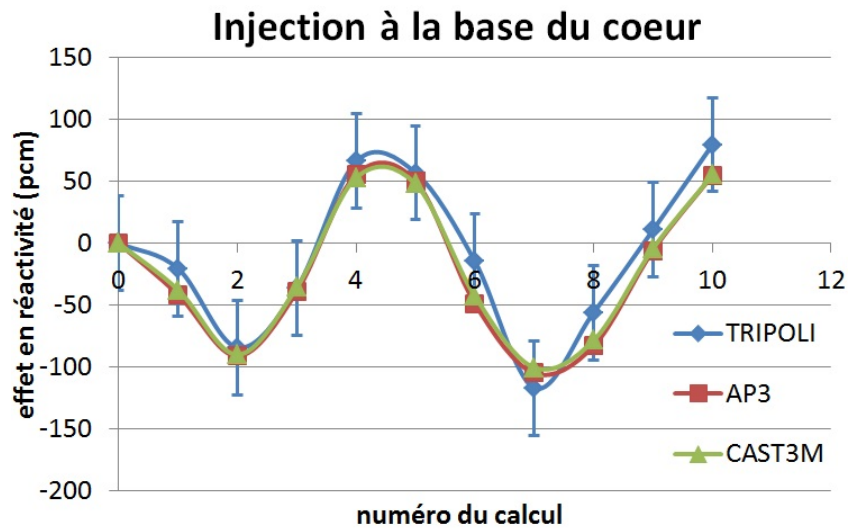


FIGURE B.3 – Effets en réactivité trouvés par TRIPOLI-4, APOLLO3® et CAST3M par injection à la base du cœur de Phénix.

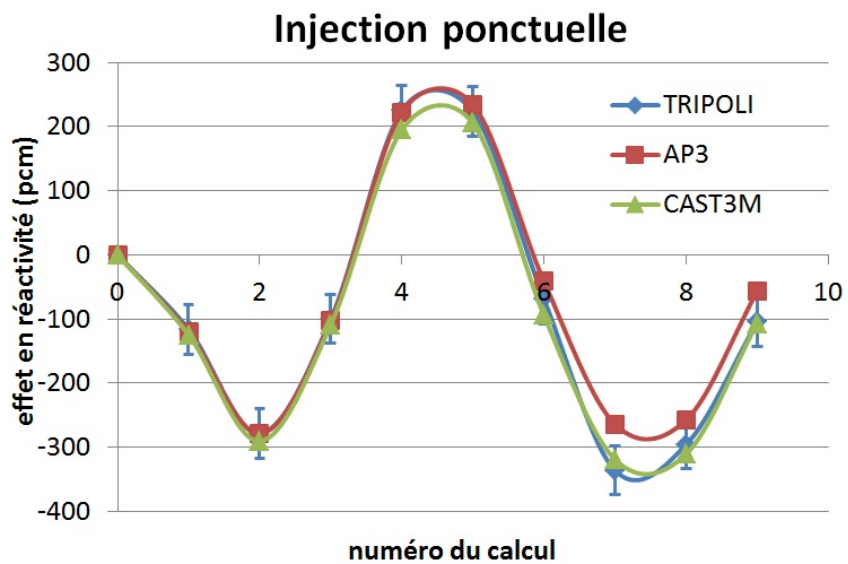


FIGURE B.4 – Effets en réactivité trouvés par TRIPOLI-4, APOLLO3® et CAST3M par injection ponctuelle dans le cœur de Phénix.

Etablissement des équations SPN

C.1 Les équations de transport

Commençons par écrire l'équation de transport cinétique (les notations sont les mêmes que celles adoptées pour l'équation (8.9), sauf que l'on note $\psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega})$ le flux angulaire du groupe d'énergie g , à la position \vec{r} , des neutrons se propageant dans la direction du vecteur unitaire $\vec{\Omega}$ et $\int_S (\cdot) d\Omega$ l'intégrale normalisée sur la sphère. σ_t^g est la section efficace macroscopique de réaction totale.) :

$$\begin{aligned} \frac{1}{V^g} \frac{\partial \psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega})}{\partial t} + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \sigma_t^g(\vec{r}) \psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \\ \sum_{g'} \int_S \sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \psi^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\Omega' \\ + \chi_p^g(\vec{r})(1 - \beta) \sum_{g'} \nu \sigma_f^{g'}(\vec{r}) \int_S \psi^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\Omega' + S_{n.ret.}^g(\vec{r}). \end{aligned} \quad (C.1)$$

$S_{n.ret.}^g(\vec{r})$ est la source due aux neutrons retardés (isotrope), qui s'écrit, comme précédemment :

$$S_{n.ret.}^g(\vec{r}) = \sum_l \chi_l^g \lambda_l C^l(\vec{r}).$$

Notons que les sections efficaces de transferts, les σ_s , sont anisotropes : elles dépendent de l'angle entre les directions d'arrivée et de départ du neutron.

Nous allons détailler les calculs pour l'équation cinétique (C.1). Pour se ramener au cas stationnaire, il suffit d'éliminer les termes $\frac{1}{V^g} \frac{\partial \psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega})}{\partial t}$ et $S_{n.ret.}^g(\vec{r}, \vec{\Omega})$ et de remplacer $\chi_p^g(\vec{r})(1 - \beta)$ par $\frac{1}{K_{eff}} \chi^g(\vec{r})$.

Considérons maintenant la condition aux limites de vide, qui s'applique à la frontière du domaine notée ∂R_v . La condition aux limites s'écrit (avec \vec{n} le vecteur unitaire orthogonal à ∂R_v et sortant) :

$$CL_{vide} : \psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = 0 \quad \forall (\vec{r}, \vec{\Omega}) \in \left\{ \vec{r} \in \partial R_v, \vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0 \right\}. \quad (C.2)$$

On peut la transformer en introduisant les composantes paires (ψ^+) et impaires (ψ^-) du flux angulaire :

$$\psi_g^\pm(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{\psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) \pm \psi^g(\vec{r}, -\vec{\Omega})}{2}.$$

En effet, on a alors

$$\begin{cases} \psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{2} \left(\psi_g^+(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \psi_g^-(\vec{r}, \vec{\Omega}) \right) \\ \psi^g(\vec{r}, -\vec{\Omega}) = \frac{1}{2} \left(\psi_g^+(\vec{r}, \vec{\Omega}) - \psi_g^-(\vec{r}, \vec{\Omega}) \right), \end{cases}$$

et en réécrivant (C.2) ainsi :

$$\psi^g(\vec{r}, -\vec{\Omega}) = 0 \quad \forall (\vec{r}, \vec{\Omega}) \in \left\{ \vec{r} \in \partial R_v, \vec{\Omega} \cdot \vec{n} > 0 \right\}$$

on obtient, en combinant les expressions précédentes (S est la sphère unité) :

$$CL_{vide} : \psi_g^-(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \text{signe}(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}) \psi_g^+(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad \forall (\vec{r}, \vec{\Omega}) \in \partial R_v \times S. \quad (C.3)$$

La condition aux limites de réflexion totale, appliquée sur la frontière ∂R_r s'écrit quant à elle :

$$CL_{refl.} : \psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}') \quad \forall (\vec{r}, \vec{\Omega}) \in \left\{ \vec{r} \in \partial R_r, \vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0 \right\}, \quad (C.4)$$

avec, si \vec{n} est colinéaire à l'axe z et $\vec{\Omega} = (\omega_x, \omega_y, \omega_z)$, $\vec{\Omega}' = (\omega_x, \omega_y, -\omega_z)$.

On remarque que lorsque $\vec{\Omega}$ vérifie $\vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0$, $\vec{\Omega}'$ vérifie $\vec{\Omega}' \cdot \vec{n} > 0$. En outre, la définition de $\vec{\Omega}'$ fait qu'il balaie toutes les directions de sa demi-sphère. Ainsi les rôles de $\vec{\Omega}$ et de $\vec{\Omega}'$ dans (C.4) sont inversibles. On montre ainsi que (C.4) se vérifie sur toute la sphère unité. De plus, en utilisant les définitions des composantes paires et impaires du flux, on montre également que :

$$CL_{refl.} : \forall (\vec{r}, \vec{\Omega}) \in \partial R_r \times S, \begin{cases} \psi_g^+(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \psi_g^+(\vec{r}, \vec{\Omega}') \\ \psi_g^-(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \psi_g^-(\vec{r}, \vec{\Omega}') \end{cases} \quad (C.5)$$

C.2 Les polynômes de Legendre

Les polynômes de Legendre vont nous servir de base angulaire pour les sections efficaces de transfert et le flux angulaire. On peut les définir par récurrence ainsi :

$$P_0(x) = 1 \quad ; \quad P_1(x) = x \quad \text{et} \quad (n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x) \quad (C.6)$$

On constate facilement, à partir de leur définition, que P_n est de degré n . On admet en outre qu'ils sont de la parité de n : $P_n(-x) = (-1)^n P_n(x)$.

On admet également cette relation :

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^1 P_n(x) P_m(x) dx = \delta_{n,m} \frac{1}{2n+1}, \quad (\text{C.7})$$

avec $\delta_{n,m} = 1$ si $n = m$ et 0 sinon. Notamment, cela signifie qu'ils sont orthogonaux pour le produit scalaire $\langle P, Q \rangle = \int_{-1}^1 P(x) Q(x) dx$.

On admet enfin le théorème d'addition suivant, valable $\forall \psi_{i=1,2} \in [0, \pi[$ tq $\psi_1 + \psi_2 \in [0, \pi[$ et $\forall \varphi$:

$$\begin{aligned} P_n(\cos \psi_1 \cos \psi_2 + \sin \psi_1 \sin \psi_2 \cos \varphi) &= P_n(\cos \psi_1) P_n(\cos \psi_2) \\ &+ 2 \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m P_n^{-m}(\cos \psi_1) P_n^m(\cos \psi_2) \cos(m\varphi). \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

On décompose les sections efficaces de transferts sur les polynômes de Legendre ainsi :

$$\sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}', \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}(\vec{r}') P_l(\vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}). \quad (\text{C.9})$$

C.3 L'approximation SPN : équations 1D

Nous allons présenter une méthode, pour obtenir les équations SPN, basée sur deux hypothèses. Il y a d'autres façons d'obtenir ces équations, avec éventuellement d'autres hypothèses. La méthode que nous présentons semble néanmoins la plus générique. [64] et [91] présentent et commentent quelques méthodes alternatives pour obtenir ces équations.

Notre première hypothèse est qu'il existe, en tout point, un système de coordonnées locales où le flux angulaire, quel que soit le groupe d'énergie, est une fonction à variations lentes en x , y et φ (voir illustration du système de coordonnées figure C.1). Ainsi on peut écrire en chaque point du réacteur :

$$\psi(x, y, z, \theta, \varphi) = \phi(z, \mu) + \epsilon \psi_\epsilon(x, y, z, \theta, \varphi), \quad (\text{C.10})$$

avec ϵ un petit paramètre et $\mu = \cos \theta$.

La seconde hypothèse est que ce système de coordonnées varie lentement en espace. En effet le terme $\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}$ de (C.1) correspond à une dérivée à $\vec{\Omega}$ fixé, ce qui ne correspond pas à μ et φ fixés si le système de coordonnées varie. On va supposer qu'on peut négliger cet effet, ce qui revient à écrire :

$$\vec{\nabla} \psi \approx \frac{\partial \phi}{\partial z} \vec{k}, \quad \mu = \vec{\Omega} \cdot \vec{k} \quad \text{et} \quad \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi \approx \mu \frac{\partial \phi}{\partial z}. \quad (\text{C.11})$$

A ces hypothèses on rajoute que ce système de coordonnées ne varie pas en temps, et que les variations temporelles de ψ sont dominées par celles de ϕ .

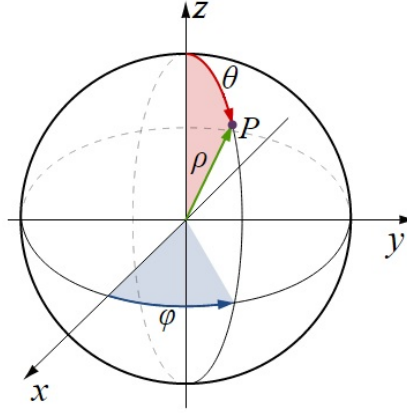


FIGURE C.1 – Illustration du système de coordonnées sphériques utilisé.

Avec ces hypothèses, en négligeant les termes en ϵ et en développant les sections de transfert sur les polynômes de Legendre, l'équation (C.1) devient :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V^g} \frac{\partial \phi^g(z, \mu)}{\partial t} + \left(\mu \frac{\partial}{\partial z} + \sigma_t^g(z) \right) \phi^g(z, \mu) = \\ & \sum_{g'} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}(z) P_l(\mu) \frac{1}{2} \int_{-1}^1 P_l(\mu') \phi^{g'}(z, \mu') d\mu' \\ & + \chi_p^g(z) (1 - \beta) \sum_{g'} \nu \sigma_f^{g'}(z) \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \phi^{g'}(z, \mu') d\mu' + S_{n.ret.}^g(z). \end{aligned} \quad (C.12)$$

Détaillons le calcul pour le terme de transfert qui est le seul non évident. En décomposant les sections de transfert sur les polynômes de Legendre comme indiqué en (C.9), puis en explicitant l'intégrale sur S on obtient :

$$\begin{aligned} & \int_S \sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \psi^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\Omega' = \\ & \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}(z) \frac{1}{4\pi} \int_{\theta'=0}^{\pi} \phi^{g'}(z, \cos \theta') \sin \theta' \int_{\varphi'=0}^{2\pi} P_l(\vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) d\varphi' d\theta'. \end{aligned}$$

On peut expliciter $\vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}$:

$$\begin{aligned} \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega} = & \sin \theta' \cos \varphi' \sin \theta \cos \varphi + \sin \theta' \sin \varphi' \sin \theta \sin \varphi + \cos \theta' \cos \theta \\ & \sin \theta' \sin \theta \underbrace{(\cos \varphi' \cos \varphi + \sin \varphi' \sin \varphi)}_{\cos(\varphi - \varphi')} + \cos \theta' \cos \theta \end{aligned}$$

On reconnaît la forme du théorème d'addition (C.8) (si $\theta + \theta' \in [\pi, 2\pi]$ on peut remplacer θ et θ' par $\pi - \theta$ et $\pi - \theta'$ sans changer le résultat final). Ainsi on a :

$$P_l(\vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) = P_l(\cos \theta) P_l(\cos \theta') + 2 \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m P_l^{-m}(\cos \theta) P_l^m(\cos \theta') \cos(m(\varphi - \varphi')).$$

Ici les P_l^m sont les fonctions de Legendre associées aux polynômes définies par :

$$P_n^m(\mu) = (1 - \mu^2)^{m/2} \left(\frac{d}{d\mu} \right)^{(m)} P_n(\mu). \quad (C.13)$$

Il est facile de voir que $\int_{\varphi'=0}^{2\pi} \cos(m(\varphi - \varphi')) d\varphi' = 0$, et qu'ainsi :

$$\frac{1}{2\pi} \int_{\varphi'=0}^{2\pi} P_l(\vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) d\varphi' = P_l(\cos \theta) P_l(\cos \theta').$$

Cela nous permet de retrouver le terme dû aux transferts de (C.12).

La condition de vide de vide s'écrit quant à elle simplement :

$$CL_{vide} : \phi_g^-(z, \mu) = \text{signe}(\mu) \phi_g^+(z, \mu) \quad \forall (z, \mu) \in \partial R_v \times [-1, 1]. \quad (C.14)$$

Pour celle de réflexion, on peut voir que le changement de $\vec{\Omega}$ à $\vec{\Omega}'$, associé à l'invariance du flux par ϕ supposé par l'hypothèse SPN et la condition (C.5) implique :

$$CL_{refl.} : \phi_g^-(z, \mu) = \phi_g^-(z, -\mu) \quad \forall (z, \mu) \in \partial R_r \times [-1, 1],$$

ce qui montre, d'après la définition de ϕ^- , que :

$$CL_{refl.} : \phi_g^-(z, \mu) = 0 \quad \forall (z, \mu) \in \partial R_v \times [-1, 1].$$

On retiendra que la condition de réflexion implique que la composante impaire du flux est nulle. Il n'y a pas de condition sur la composante paire.

Introduisons maintenant l'approximation PN qui consiste à décomposer le flux angulaire sur les polynômes de Legendre en se limitant à l'ordre N :

$$\phi^g(z, \mu) \approx \sum_{l=0}^N \alpha_l \phi_l^g(z) P_l(\mu). \quad (C.15)$$

Les α_l sont des scalaires qu'on se donne pour simplifier la résolution du problème par la suite. Dans la suite, N sera toujours impair et on note $N_h = (N + 1)/2$.

On injecte ce développement dans (C.12), puis on multiplie l'équation par $\alpha_l P_l(\mu)$, et on intègre sur μ variant de -1 à 1 (normalisé). On obtient ainsi :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V^g} \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \alpha_l P_l(\mu) \sum_{l'=0}^N \alpha_{l'} P_{l'}(\mu) \frac{\partial \phi_{l'}^g(z)}{\partial t} d\mu + \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \alpha_l P_l(\mu) \left(\mu \frac{\partial}{\partial z} + \sigma_t^g(z) \right) \sum_{l''=0}^N \alpha_{l''} \phi_{l''}^g(z) P_{l''}(\mu) d\mu \\ &= \sum_{g'} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l' + 1) \sigma_{sl'}^{g' \rightarrow g}(z) \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \alpha_l P_l(\mu) P_{l'}(\mu) \frac{1}{2} \int_{-1}^1 P_l(\mu') \sum_{l''=0}^N \alpha_{l''} \phi_{l''}^g(z) P_{l''}(\mu') d\mu' d\mu \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \chi_p^g(z)(1 - \beta) \sum_{g'} \nu \sigma_f^{g'}(z) \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \alpha_l P_l(\mu) d\mu \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \sum_{l'=0}^N \alpha_{l'} \phi_{l'}^g(z) P_{l'}(\mu') d\mu' \\
& + S_{n.ret.}^g(z) \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \alpha_l P_l(\mu) d\mu.
\end{aligned}$$

La relation de récurrence (C.6) nous permet de transformer le terme en $\mu P_l(\mu)$, venant du transport des neutrons :

$$\mu P_l(\mu) = \frac{l+1}{2l+1} P_{l+1}(\mu) + \frac{l}{2l+1} P_{l-1}(\mu).$$

En outre, la relation (C.7) nous permet de calculer facilement toutes les intégrales de l'expression précédente (en n'oubliant pas que $P_0(x) = 1$). On obtient alors :

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{V^g} t_l \frac{\partial \phi_l^g(z)}{\partial t} + h_l \frac{\partial \phi_{l-1}^g(z)}{\partial z} + h_{l+1} \frac{\partial \phi_{l+1}^g(z)}{\partial z} + t_l \sigma_{disp\ l}^g(z) \phi_l^g(z) = \\
& \sum_{g' \neq g} t_l \sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}(z) \phi_l^{g'}(z) + \delta_{l,0} t_0 \chi_p^g(z) (1 - \beta) \sum_{g'} \nu \sigma_f^{g'}(z) \phi_0^{g'} + \delta_{l,0} S_{n.ret.}^g(z),
\end{aligned} \tag{C.16}$$

$$\text{avec } h_m = \frac{m \alpha_m \alpha_{m-1}}{(2m+1)(2m-1)}, \quad t_m = \frac{\alpha_l^2}{(2l+1)} \text{ et } \sigma_{disp\ l}^g = \sigma_t^g - \sigma_{sl}^{g \rightarrow g}.$$

Pour obtenir la nouvelle forme de la condition aux limites de vide, on multiplie l'équation précédent (C.14) par $\mu \alpha_{2i} P_{2i}(\mu)$ et on intègre sur $\mu \in [0, 1]$. Le premier terme devient :

$$\frac{1}{2} \int_0^1 \sum_{l=0}^N \alpha_l \phi_l^g(z) (P_l(\mu) - P_l(-\mu)) \mu \alpha_{2i} P_{2i}(\mu) d\mu.$$

En l'écrivant comme une somme de deux intégrale, une avec $P_l(\mu)$ et l'autre avec $P_l(-\mu)$ et en faisant le changement de variable $\mu \rightarrow -\mu$ dans la deuxième intégrale, on arrive à une forme déjà vue :

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^1 \sum_{l=0}^N \alpha_l \phi_l^g(z) P_l(\mu) \mu \alpha_{2i} P_{2i}(\mu) d\mu = h_{2i} \phi_{2i-1}^g + h_{2i+1} \phi_{2i+1}^g.$$

Le deuxième terme de (C.14) devient :

$$\frac{1}{2} \int_0^1 \sum_{l=0}^N \alpha_l \phi_l^g(z) (P_l(\mu) + P_l(-\mu)) \mu \alpha_{2i} P_{2i}(\mu) d\mu.$$

On remarque que les termes avec l impair s'éliminent. Il reste alors :

$$\sum_{2i'=0}^{N-1} \phi_{2i'}^g(z) \alpha_{2i} \alpha_{2i'} \int_0^1 \mu P_{2i}(\mu) P_{2i'}(\mu) d\mu.$$

On écrira donc la condition aux limites :

$$CL_{vide} : h_{2i}\phi_{2i-1}^g + h_{2i+1}\phi_{2i+1}^g = \sum_{2i'=0}^{N-1} h_{2i,2i'}^b \phi_{2i'}^g(z), \quad (C.17)$$

$$\text{avec } h_{l,k}^b = \alpha_l \alpha_k \int_0^1 \mu P_l(\mu) P_k(\mu) d\mu.$$

C.4 Equations 3D

Bien qu'on soit parti d'un problème 3D, nous sommes arrivés à des équations 1D dans le système de coordonnées local adapté. Pour se ramener à une formulation 3D, on multiplie chaque équation impaire de (C.16) par \vec{k} , le vecteur du système de coordonnées local (qui peut varier spatialement). A la frontière, \vec{k} est colinéaire à \vec{n} . On peut exprimer ainsi le problème sous la forme d'un système d'équations où les composantes paires du flux sont des fonctions scalaires et les composantes impaires des fonctions vectorielles. Cette opération permet d'utiliser les opérateurs vectoriels classiques. Le système s'écrit :

$$\begin{cases} I_i \frac{\partial}{\partial t} \vec{\phi}_i + T_i \vec{\phi}_i + H \vec{\nabla} \phi_p = \vec{S}_i \\ I_p \frac{\partial}{\partial t} \phi_p + H^T \vec{\nabla} \cdot \vec{\phi}_i + T_p \phi_p = S_p, \end{cases} \quad (C.18)$$

avec la condition aux limites de vide écrite ainsi :

$$CL_{vide} : H^T (\vec{\phi}_i \cdot \vec{n}) = \Gamma_p \phi_p, \text{ à la frontière.} \quad (C.19)$$

Celle de réflexion est simplement :

$$CL_{refl.} : \vec{\phi}_i = \vec{0}, \text{ à la frontière.} \quad (C.20)$$

On a noté ϕ_p et $\vec{\phi}_i$ les composantes paires et impaires du flux angulaire :

$$\begin{aligned} \phi_p &= [\phi_p^1, \phi_p^2, \dots, \phi_p^G]^T \text{ avec } \phi_p^g = [\phi_0^g, \phi_2^g, \dots, \phi_{N-1}^g]^T, \\ \vec{\phi}_i &= [\vec{\phi}_i^1, \vec{\phi}_i^2, \dots, \vec{\phi}_i^G]^T \text{ avec } \vec{\phi}_i^g = [\vec{\phi}_1^g, \vec{\phi}_3^g, \dots, \vec{\phi}_N^g]^T. \end{aligned}$$

I_p et I_i sont des matrices dites d'inertie paires et impaires (et diagonales) :

$$\begin{aligned} I_p &= \text{diag}(I_p^1, I_p^2, \dots, I_p^G) \text{ avec } I_p^g = \text{diag}(t_0/V^g, t_2/V^g, \dots, t_{N-1}/V^g), \\ I_i &= \text{diag}(I_i^1, I_i^2, \dots, I_i^G) \text{ avec } I_i^g = \text{diag}(t_1/V^g, t_3/V^g, \dots, t_N/V^g). \end{aligned}$$

T_p et T_i sont les matrices de disparition paires et impaires (et diagonales) :

$$\begin{aligned} T_p &= \text{diag}(T_p^1, T_p^2, \dots, T_p^G) \text{ avec } T_p^g = \text{diag}(t_0 \sigma_{disp\ 0}^g, t_2 \sigma_{disp\ 2}^g, \dots, t_{N-1} \sigma_{disp\ N-1}^g), \\ T_i &= \text{diag}(T_i^1, T_i^2, \dots, T_i^G) \text{ avec } T_i^g = \text{diag}(t_1 \sigma_{disp\ 1}^g, t_3 \sigma_{disp\ 3}^g, \dots, t_N \sigma_{disp\ N}^g). \end{aligned}$$

S_p et \vec{S}_i sont les composantes paires et impaires de la source :

$$S_p = T_{sp}\phi_p + (1 - \beta)P_p\phi_p + S_{n.ret. p} \text{ et } \vec{S}_i = T_{si}\vec{\phi}_i.$$

T_{sp} et T_{si} sont les matrices de transferts paires et impaires (les termes sont nuls lorsque $g' = g$) :

$$T_{sp} = [T_{sp}^{gg'}] \text{ avec } T_{sp}^{gg'} = \text{diag}(t_0\sigma_{s0}^{g'\rightarrow g}, t_2\sigma_{s2}^{g'\rightarrow g}, \dots, t_{N-1}\sigma_{sN-1}^{g'\rightarrow g}),$$

$$T_{si} = [T_{si}^{gg'}] \text{ avec } T_{si}^{gg'} = \text{diag}(t_1\sigma_{s1}^{g'\rightarrow g}, t_3\sigma_{s3}^{g'\rightarrow g}, \dots, t_N\sigma_{sN}^{g'\rightarrow g}).$$

La matrice de fission P_p s'exprime :

$$P_p = \begin{bmatrix} \chi_{pp}^1 \\ \chi_{pp}^2 \\ \vdots \\ \chi_{pp}^G \end{bmatrix} \cdot [F_p^1, F_p^2, \dots, F_p^G] \text{ avec } \chi_{pp}^g = \begin{bmatrix} \chi_p^g \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \text{ et } F_p^g = [\nu\sigma_f^g, 0, \dots, 0].$$

La source de neutrons retardés s'écrit :

$$S_{n.ret. p} = [S_{n.ret. p}^1, S_{n.ret. p}^2, \dots, S_{n.ret. p}^G]^T \text{ avec } S_{n.ret. p}^g = [S_{n.ret. p}^g, 0, \dots, 0]^T.$$

H est constituée de blocs diagonaux identiques :

$$H = \text{diag}(H^d, H^d, \dots, H^d) \text{ avec } H^d = \begin{bmatrix} h_1 & h_2 & . & 0 & 0 \\ 0 & h_3 & . & 0 & 0 \\ . & . & . & . & . \\ 0 & 0 & . & h_{N-2} & h_{N-1} \\ 0 & 0 & . & 0 & h_N \end{bmatrix}.$$

Enfin Γ_p est également constituée de blocs diagonaux identiques. Elle est définie sur la frontière par :

$$\Gamma_p = \text{diag}(\Gamma_p^d, \Gamma_p^d, \dots, \Gamma_p^d) \text{ avec } (\Gamma_p^d)_{i,j} = h_{2(i-1), 2(j-1)}^b.$$

Le calcul de ses termes en SP5 donne :

$$\Gamma_p^d = \begin{bmatrix} 0.5 & \frac{5}{16} & -\frac{9}{128} \\ \frac{5}{16} & \frac{25}{32} & \frac{585}{2048} \\ -\frac{9}{128} & \frac{585}{2048} & \frac{6561}{8192} \end{bmatrix}.$$

C.5 Forme diagonalisée

Nous allons maintenant diagonaliser le système (C.18). On verra ensuite que cela permet d'identifier les équations SPN à celles SP1 avec une augmentation du nombre de groupes.

La diagonalisation se fait par changement de variable. Il y a deux façons de procéder, selon que l'on modifie les variables paires ou impaires. Ici nous allons présenter la méthode primale où le changement de variable est fait sur les termes pairs. Il s'agit de poser :

$$\tilde{\phi}_p = H\phi_p. \quad (\text{C.21})$$

En multipliant les équations paires de (C.18) ainsi que la condition aux limites (C.19) par $H^{-T} = (H^T)^{-1}$, on obtient :

$$\begin{cases} I_i \frac{\partial}{\partial t} \vec{\phi}_i + T_i \vec{\phi}_i + \vec{\nabla} \tilde{\phi}_p = \vec{S}_i \\ (H^{-T} I_p H^{-1}) \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\phi}_p + \vec{\nabla} \cdot \vec{\phi}_i + (H^{-T} T_p H^{-1}) \tilde{\phi}_p = H^{-T} S_p, \end{cases} \quad (\text{C.22})$$

avec :

$$H^{-T} S_p = H^{-T} T_{sp} H^{-1} \tilde{\phi}_p + (1 - \beta) H^{-T} P_p H^{-1} \tilde{\phi}_p + H^{-T} S_{n.ret. p}$$

et la condition de vide :

$$CL_{vide} : \vec{\phi}_i \cdot \vec{n} = (H^{-T} \Gamma_p H^{-1}) \tilde{\phi}_p. \quad (\text{C.23})$$

Il est temps de fixer les valeurs des α_l . En prenant $\alpha_0 = 1$ et $\alpha_l = \frac{4l^2 - 1}{l\alpha_{l-1}}$, les h_i deviennent égaux à 1 et la matrice H^d devient :

$$H^d = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & . \\ 0 & 1 & 1 & 0 & . \\ 0 & 0 & 1 & 1 & . \\ 0 & 0 & 0 & 1 & . \\ . & . & . & . & . \end{bmatrix}.$$

H^{-1} et H^{-T} sont respectivement composés des blocs H_d^{-1} et H_d^{-T} :

$$H_d^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 & . \\ 0 & 1 & -1 & 1 & . \\ 0 & 0 & 1 & -1 & . \\ 0 & 0 & 0 & 1 & . \\ . & . & . & . & . \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad H_d^{-T} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & . \\ -1 & 1 & 0 & 0 & . \\ 1 & -1 & 1 & 0 & . \\ -1 & 1 & -1 & 1 & . \\ . & . & . & . & . \end{bmatrix}.$$

Le choix des α_l fixe les t_l et on a :

$$t_0 = 1; t_1 = 3; t_2 = \frac{5}{4}; t_3 = \frac{28}{9}; t_4 = \frac{81}{64}; t_5 = \frac{704}{225}.$$

On a également :

$$\begin{aligned}
(H_d^{-T} I_p^g H_d^{-1}) &= \left[(-1)^{i+j} \sum_{k=1}^{\min(i,j)} \frac{t_{2(k-1)}}{V^g} \right]_{i,j}, \\
(H_d^{-T} T_p^g H_d^{-1}) &= \left[(-1)^{i+j} \sum_{k=1}^{\min(i,j)} t_{2(k-1)} \sigma_{disp\ 2(k-1)}^g \right]_{i,j}, \\
(H_d^{-T} T_{sp}^{gg'} H_d^{-1}) &= \left[(-1)^{i+j} \sum_{k=1}^{\min(i,j)} t_{2(k-1)} \sigma_{s2(k-1)}^{g' \rightarrow g} \right]_{i,j}, \\
(H_d^{-T} P_p^{gg'} H_d^{-1}) &= \begin{bmatrix} \chi_p^g \\ -\chi_p^g \\ \chi_p^g \\ \vdots \end{bmatrix} \cdot [\nu \sigma_f^{g'}, -\nu \sigma_f^{g'}, \nu \sigma_f^{g'}, \dots]
\end{aligned}$$

et

$$H_d^{-T} S_{n.ret.\ p}^g = [S_{n.ret.\ }^g, -S_{n.ret.\ }^g, S_{n.ret.\ }^g, \dots]^T.$$

C.6 Identification SPN/SP1

Il est possible de résoudre les équations (C.22) et (C.23) comme des équations SP1 en traitant les harmoniques du SPN comme des pseudos-groupes d'énergie. On passe ainsi des équations SPN à G groupes d'énergie aux équations SP1 à $N_h G$ groupes d'énergie.

Pour faire cette identification nous allons introduire une nouvelle hypothèse. Nous allons supposer que le terme en dérivée temporelle de l'équation impaire, $I_i \frac{\partial}{\partial t} \vec{\phi}_i$, est nul. Cela ne signifie pas que les harmoniques impaires ne varient pas en temps, mais qu'ils s'équilibrent instantanément avec les harmoniques paires.

Ecrivons avec cette hypothèse l'identification pour l'équation impaire. On note (g, i) les pseudos-groupes d'énergie. L'équation impaire SP1 de ce pseudo-groupe s'écrit :

$$t_1 \sigma_{disp\ 1}^{(g,i)} \vec{\phi}_1^{(g,i)} + \vec{\nabla} \tilde{\phi}_0^{(g,i)} = \sum_{(g',j) \neq (g,i)} t_1 \sigma_{s1}^{(g',j) \rightarrow (g,i)} \vec{\phi}_1^{(g,i)}.$$

La ligne i de l'équation impaire SPN du groupe d'énergie g s'écrit :

$$t_{2i-1} \sigma_{disp\ 2i-1}^g \vec{\phi}_{2i-1}^g + \vec{\nabla} \tilde{\phi}_{2(i-1)}^g = \sum_{g' \neq g} t_{2i-1} \sigma_{s2i-1}^{g' \rightarrow g} \vec{\phi}_{2i-1}^g.$$

L'identification terme à terme donne :

$$\sigma_{disp\ 1}^{(g,i)} = \frac{t_{2i-1}}{3} \sigma_{disp\ 2i-1}^g \text{ et pour } g \neq g' \sigma_{s1}^{(g',j) \rightarrow (g,i)} = \frac{t_{2i-1}}{3} \sigma_{s2i-1}^{g' \rightarrow g} \delta_{i,j}.$$

On peut le réécrire :

$$\sigma_t^{(g,i)} = \frac{t_{2i-1}}{3} \sigma_t^g$$

et

$$\sigma_{s1}^{(g',j) \rightarrow (g,i)} = \frac{t_{2i-1}}{3} \sigma_{s2i-1}^{g' \rightarrow g} \delta_{i,j}.$$

Ecrivons maintenant l'équation paire SP1 du pseudo-groupe (g, i) :

$$\begin{aligned} \frac{1}{V^{(g,i)}} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\phi}_0^{(g,i)} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\phi}_1^{(g,i)} + \sigma_{disp\ 0}^{(g,i)} \tilde{\phi}_0^{(g,i)} = \\ \sum_{(g',j) \neq (g,i)} \sigma_{s0}^{(g',j) \rightarrow (g,i)} \tilde{\phi}_0^{(g',j)} + (1 - \beta) \chi_p^{(g,i)} \sum_{(g',j)} \nu \sigma_f^{(g',j)} \tilde{\phi}_0^{(g',j)} + S_{n.ret.}^{(g,i)}. \end{aligned}$$

On a également la ligne i de l'équation paire SPN du groupe d'énergie g :

$$\begin{aligned} \sum_j (-1)^{i+j} \sum_{k=1}^{\min(i,j)} \frac{t_{2(k-1)}}{V^g} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\phi}_{2(j-1)}^g + \vec{\nabla} \cdot \vec{\phi}_{2i-1}^g + \sum_j (-1)^{i+j} \sum_{k=1}^{\min(i,j)} t_{2(k-1)} \sigma_{disp\ 2(k-1)}^g \tilde{\phi}_{2(j-1)}^g \\ = \sum_{g' \neq g} \sum_j (-1)^{i+j} \sum_{k=1}^{\min(i,j)} t_{2(k-1)} \sigma_{s2(k-1)}^{g' \rightarrow g} \tilde{\phi}_{2(j-1)}^{g'} + (1 - \beta) (-1)^{i+1} \chi_p^g \sum_{g'} \sum_j \nu \sigma_f^{g'} (-1)^{j+1} \tilde{\phi}_{2(j-1)}^{g'} \\ + (-1)^{i+1} S_{n.ret.}^g. \end{aligned}$$

Pour l'identification on fait passer les termes non diagonaux issus de la matrice $(H^{-T} T_p H^{-1})$ du côté des sources et on les identifie à des transferts. Les termes non diagonaux issus de $(H^{-T} I_p H^{-1})$, et donc porteurs de dérivées temporels, sont pour l'instant simplement réécrits comme un terme source supplémentaire. On commence par réécrire l'équation ainsi :

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^i \frac{t_{2(k-1)}}{V^g} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\phi}_{2(i-1)}^g + \vec{\nabla} \cdot \vec{\phi}_{2i-1}^g + \sum_{k=1}^i t_{2(k-1)} \sigma_{disp\ 2(k-1)}^g \tilde{\phi}_{2(i-1)}^g \\ = \sum_{g' \neq g} \sum_j (-1)^{i+j} \sum_{k=1}^{\min(i,j)} t_{2(k-1)} \sigma_{s2(k-1)}^{g' \rightarrow g} \tilde{\phi}_{2(j-1)}^{g'} \\ + \sum_{j \neq i} (-1)^{i+j+1} \sum_{k=1}^{\min(i,j)} \frac{t_{2(k-1)}}{V^g} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\phi}_{2(j-1)}^g \\ + \sum_{j \neq i} (-1)^{i+j+1} \sum_{k=1}^{\min(i,j)} t_{2(k-1)} \sigma_{disp\ 2(k-1)}^g \tilde{\phi}_{2(j-1)}^g \\ + (1 - \beta) (-1)^{i+1} \chi_p^g \sum_{g'} \sum_j \nu \sigma_f^{g'} (-1)^{j+1} \tilde{\phi}_{2(j-1)}^{g'} + (-1)^{i+1} S_{n.ret.}^g. \end{aligned}$$

Ce qu'on peut réécrire :

$$\begin{aligned}
& \sum_{k=1}^i \frac{t_{2(k-1)}}{V^g} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\phi}_{2(i-1)}^g + \vec{\nabla} \cdot \vec{\phi}_{2i-1}^g + \sum_{k=1}^i t_{2(k-1)} \sigma_{disp\ 2(k-1)}^g \tilde{\phi}_{2(i-1)}^g \\
&= \sum_{(g',j) \neq (g,i)} (-1)^{i+j+1} \sum_{k=1}^{\min(i,j)} t_{2(k-1)} \left(\delta_{g,g'} \sigma_t^g - \sigma_{s2(k-1)}^{g' \rightarrow g} \right) \tilde{\phi}_{2(j-1)}^{g'} \\
&+ (1-\beta)(-1)^{i+1} \chi_p^g \sum_{g'} \sum_j \nu \sigma_f^{g'} (-1)^{j+1} \tilde{\phi}_{2(j-1)}^{g'} + (-1)^{i+1} S_{n.ret.}^g \\
&+ \sum_{j \neq i} (-1)^{i+j+1} \sum_{k=1}^{\min(i,j)} \frac{t_{2(k-1)}}{V^g} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\phi}_{2(j-1)}^g.
\end{aligned}$$

Ainsi l'identification de l'équation paire nous donne :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{V^{(g,i)}} &= \sum_{k=1}^i \frac{t_{2(k-1)}}{V^g}, \\
\sigma_{disp\ 0}^{(g,i)} &= \sum_{k=1}^i t_{2(k-1)} \sigma_{disp\ 2(k-1)}^g, \\
\sigma_{s0}^{(g',j) \rightarrow (g,i)} &= (-1)^{i+j+1} \sum_{k=1}^{\min(i,j)} t_{2(k-1)} \left(\delta_{g,g'} \sigma_t^g - \sigma_{s2(k-1)}^{g' \rightarrow g} \right) \text{ pour } (g',j) \neq (g,i), \\
\chi_p^{(g,i)} &= (-1)^{i+1} \chi_p^g, \\
\nu \sigma_f^{(g,i)} &= (-1)^{i+1} \nu \sigma_f^g, \\
S_{n.ret.}^{(g,i)} &= (-1)^{i+1} S_{n.ret.}^g.
\end{aligned}$$

et une source supplémentaire que l'on peut écrire ainsi :

$$S_{supl.}^{(g,i)} = \sum_{j \neq i} (-1)^{i+j+1} \frac{1}{V^{(g,\min(i,j))}} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\phi}_{2(j-1)}^g.$$

On rappelle que la source de fission s'écrit ainsi :

$$S_{n.ret.}^g(\vec{r'}) = \sum_l \chi_l^g \lambda_l C^l(\vec{r'}).$$

Pour conséquent on peut identifier le spectre de neutrons retardés du pseudo-groupe :

$$\chi_l^{(g,i)} = (-1)^{i+1} \chi_l^g.$$

C.7 Ecriture sous la forme d'un problème de diffusion

Pour transformer le problème (C.22) et (C.23), écrit en SP1 avec $N_h G$ groupes d'énergie, nous allons supposer que les transferts impairs sont nuls, c'est à dire que $\sigma_{s2i-1}^g = 0 \forall g \forall i > 0$.

Avec cette hypothèse, la source \vec{S}_i est nulle est l'équation impaire devient simplement :

$$\vec{\phi}_1^{(g,i)} = -\frac{1}{3\sigma_{disp\ 1}^{(g,i)}} \vec{\nabla} \tilde{\phi}_0^{(g,i)} = -\frac{1}{3\sigma_t^{(g,i)}} \vec{\nabla} \tilde{\phi}_0^{(g,i)}.$$

Ainsi l'équation paire peut s'écrire sous la forme attendue et déjà annoncée (11.1) :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V^{(g,i)}} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\phi}_0^{(g,i)} - \vec{\nabla} D^{(g,i)} \vec{\nabla} \tilde{\phi}_0^{(g,i)} + \sigma_{disp\ 0}^{(g,i)} \tilde{\phi}_0^{(g,i)} = \\ & \sum_{(g',j) \neq (g,i)} \sigma_{s0}^{(g',j) \rightarrow (g,i)} \tilde{\phi}_0^{(g',j)} + (1 - \beta) \chi_p^{(g,i)} \sum_{(g',j)} \nu \sigma_f^{(g,i)} \tilde{\phi}_0^{(g',j)} + \sum_l \chi_l^{(g,i)} \lambda_l C^l + S_{supl.}^{(g,i)}, \end{aligned} \quad (C.24)$$

avec :

$$D^{(g,i)} = \frac{1}{3\sigma_t^{(g,i)}}. \quad (C.25)$$

On reconnait une équation de diffusion instationnaire classique, avec les paramètres identifiés précédemment et un terme source supplémentaire. Mis à part ce terme source, cette équation pourra être traitée par les solveurs de diffusion classiques.

Ce terme supplémentaire peut être traité de façon simple quand on utilise un θ -schéma avec $\theta \neq 0$. En effet, une partie de ce terme peut être intégré dans les sections de transfert. Ecrivons uniquement le terme de transfert et le terme source supplémentaire avec différences finies pour les dérivées temporelles et un θ -schéma pour les transferts (le pas de temps dure Δt et on suppose $t = 0$ à son début) :

$$\begin{aligned} & \theta \sum_{(g',j) \neq (g,i)} (-1)^{i+j+1} \sum_{k=1}^{\min(i,j)} t_{2(k-1)} \left(\delta_{g,g'} \sigma_t^g - \sigma_{s2(k-1)}^{g' \rightarrow g} \right) \tilde{\phi}_{2(j-1)}^{g'}(\Delta t) \\ & + (1 - \theta) \sum_{(g',j) \neq (g,i)} (-1)^{i+j+1} \sum_{k=1}^{\min(i,j)} t_{2(k-1)} \left(\delta_{g,g'} \sigma_t^g - \sigma_{s2(k-1)}^{g' \rightarrow g} \right) \tilde{\phi}_{2(j-1)}^{g'}(0) \\ & + \sum_{j \neq i} (-1)^{i+j+1} \sum_{k=1}^{\min(i,j)} \frac{t_{2(k-1)}}{V^g} \frac{\tilde{\phi}_{2(j-1)}^g(\Delta t) - \tilde{\phi}_{2(j-1)}^g(0)}{\Delta t}. \end{aligned}$$

On remarque que ces termes peuvent se réécrire :

$$\theta \sum_{(g',j) \neq (g,i)} (-1)^{i+j+1} \sum_{k=1}^{\min(i,j)} t_{2(k-1)} \left(\delta_{g,g'} \left(\sigma_t^g + \frac{1}{\theta V^g \Delta t} \right) - \sigma_{s2(k-1)}^{g' \rightarrow g} \right) \tilde{\phi}_{2(j-1)}^{g'}(\Delta t)$$

$$\begin{aligned}
& + (1 - \theta) \sum_{(g',j) \neq (g,i)} (-1)^{i+j+1} \sum_{k=1}^{\min(i,j)} t_{2(k-1)} \left(\delta_{g,g'} (\sigma_t^g + \frac{1}{\theta V g \Delta t}) - \sigma_{s2(k-1)}^{g' \rightarrow g} \right) \tilde{\phi}_{2(j-1)}^{g'}(0) \\
& + \sum_{j \neq i} (-1)^{i+j} \sum_{k=1}^{\min(i,j)} \frac{t_{2(k-1)}}{V g} \frac{1}{\theta \Delta t} \tilde{\phi}_{2(j-1)}^g(0).
\end{aligned}$$

Il suffit donc de modifier les sections de transfert pour les calculs cinétiques en :

$$\sigma_{s0}^{(g',j) \rightarrow (g,i)} = (-1)^{i+j+1} \sum_{k=1}^{\min(i,j)} t_{2(k-1)} \left(\delta_{g,g'} (\sigma_t^g + \frac{1}{\theta V g \Delta t}) - \sigma_{s2(k-1)}^{g' \rightarrow g} \right) \text{ pour } (g',j) \neq (g,i), \quad (\text{C.26})$$

et de rajouter un terme source constant :

$$S_{supl. \text{ const.}}^{(g,i)} = \sum_{j \neq i} (-1)^{i+j} \frac{1}{\theta V (g, \min(i,j)) \Delta t} \tilde{\phi}_{2(j-1)}^g(0). \quad (\text{C.27})$$

La condition aux limites de vide, quant à elle, s'écrit toujours comme un produit matrice-vecteur :

$$CL_{vide} : \vec{\nabla} \tilde{\phi}_0^{(g,i)} \cdot \vec{n} = -3\sigma_t^{(g,i)} \sum_j \left(H^{-T} \Gamma_p^d H^{-1} \right)_{i,j} \tilde{\phi}_0^{(g,j)}, \text{ à la frontière.} \quad (\text{C.28})$$

La condition de réflexion est toujours celle du flux impair nul :

$$CL_{refl.} : \vec{\nabla} \tilde{\phi}_0^{(g,i)} = \vec{0}, \text{ à la frontière.} \quad (\text{C.29})$$

C.8 Conclusion

Si les calculs pour mettre le problème sous la forme (C.24) et (C.28) sont longs, le développement informatique qui suit est faible quand on dispose d'un solveur de diffusion. Il suffit en effet de calculer les paramètres des pseudos-groupes, la source supplémentaire et de gérer la nouvelle condition aux limites. Celle-ci est un peu problématique puisqu'elle couple plusieurs pseudos-groupes d'énergie, mais un simple processus itératif suffit.

Listons pour mémoire les hypothèses qui ont été faites :

1. Existence en tout point d'un système de coordonnées où le flux angulaire varie lentement en x , y et φ , puis élimination de ces dépendances ;
2. Variation spatiale lente de ce système de coordonnées, et pas de variation temporelle ;
3. Troncature à l'ordre N de la décomposition du flux angulaire sur les polynômes de Legendre ;
4. Le flux impair est supposé être toujours à l'équilibre avec le flux pair (dérivée temporelle nulle) ;

5. Les transferts impairs sont supposés nuls ;

Les deux premières hypothèses sont liées à la validité du modèle SPN lui-même. L'hypothèse 3 est une erreur due à la représentation numérique, et donc discrète, des équations de la physique qui sont continues. Ce type d'erreur est inévitable et la résolution de (C.24) en introduira d'autres. Il faudra s'assurer à la fin du processus que cette représentation discrète est bien faite et n'introduit pas d'erreurs trop fortes. Les hypothèses 4 et 5 sont nécessaires pour identifier les équations SPN au SP1 puis à la diffusion. Ce sont des hypothèses sur la physique des phénomènes.

Cas de la géométrie sphérique

Les symétries de la géométrie sphérique en font un cas d'application qui peut apparaître pertinent pour le SPN. Nous allons voir ici que si on peut établir des équations PN assez simples sur ce cas, la simplification SPN n'y est pas très précise.

D.1 L'hypothèse SPN

Commençons par introduire le système de coordonnées dans lequel nous allons travailler. Le point de l'espace \vec{r} est repéré par les coordonnées sphériques ordinaires : la distance à l'origine (le centre de la sphère étudiée) ρ , la colatitute β (comptée à partir de \vec{z}) et la longitude α (comptée à partir de \vec{x}). La direction du neutron, $\vec{\Omega}$ est repérée dans un repère local : colatitute θ comptée à partir de \vec{r}/ρ et longitude φ comptée à partir du méridien contenant \vec{z} . La figure D.1 donne une représentation de ce système de coordonnées.

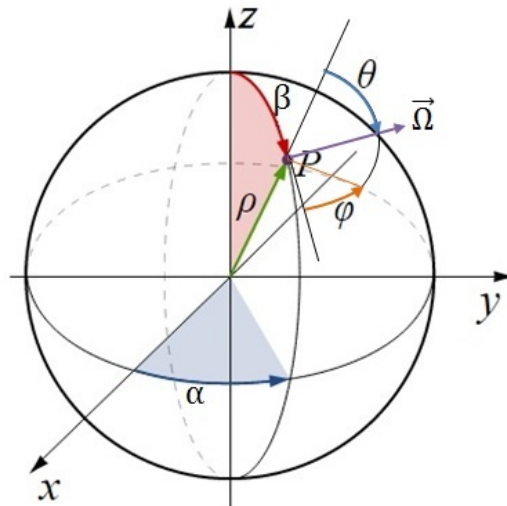


FIGURE D.1 – Illustration du système de coordonnées utilisé en géométrie sphérique pour repérer le flux angulaire.

Grâce à ce repérage, la symétrie du problème permet d'éliminer les variables α , β et φ . Ainsi le flux angulaire, qui dépend normalement de 5 variables, ne dépend plus que de deux d'entre elles, ρ et θ :

$$\psi(\rho, \alpha, \beta, \theta, \varphi) = \phi(\rho, \theta).$$

La première hypothèse du SPN, explicitée par l'équation (C.10), est donc vérifiée de façon exacte dans ce cas, et permet de faire un calcul à une seule dimension d'espace. Insistons sur le fait que ce n'est pas vrai si on n'utilise pas un repère mobile pour θ et φ . Avec un repère fixe on ne pourrait éliminer aucune dépendance.

Cependant, le repère utilisé pour repérer θ et φ varie fortement dans l'espace à proximité du centre. On peut donc craindre que la seconde hypothèse, explicitée par (C.11), ne soit pas vérifiée. Pour évaluer l'erreur commise, on va calculer explicitement $\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi$.

ψ ne dépendant ni de α , ni de β , on a (on remplace ici la dépendance en θ par celle en son cosinus, μ) :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi = \Omega_\rho \left(\frac{\partial}{\partial \rho} \phi(\rho, \mu) \right)_{\vec{\Omega}}.$$

On a bien sûr $\Omega_\rho = \mu$. La différence avec (C.11) est que la dérivée partielle est prise à $\vec{\Omega}$ fixé et non à θ fixé. On peut cependant écrire :

$$\left(\frac{\partial}{\partial \rho} \phi(\rho, \mu) \right)_{\vec{\Omega}} = \frac{\partial}{\partial \rho} \phi(\rho, \mu) + \left(\frac{\partial}{\partial \rho} \mu \right)_{\vec{\Omega}} \frac{\partial}{\partial \mu} \phi(\rho, \mu),$$

où les dérivées partielles sans notations particulières sont prises respectivement à μ et ρ fixés.

Des considérations géométriques simples (voir figure D.2), permettent d'obtenir :

$$\left(\frac{\partial}{\partial \rho} \mu \right)_{\vec{\Omega}} = \frac{1 - \mu^2}{\rho \mu}.$$

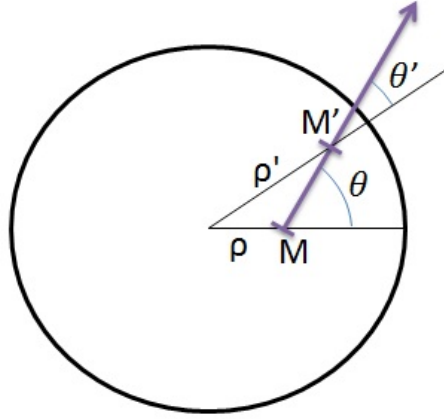


FIGURE D.2 – Repérage de la position et de la direction d'un neutron (en violet) en géométrie sphérique. θ peut y être vu comme une fonction de ρ .

On obtient finalement :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi = \mu \frac{\partial}{\partial \rho} \phi(\rho, \mu) + \frac{1 - \mu^2}{\rho} \frac{\partial}{\partial \mu} \phi(\rho, \mu). \quad (\text{D.1})$$

Cette expression, que l'on retrouve dans le précis de neutronique de Paul Reuss [103], nous donne le terme négligé par l'approximation SPN sur ce cas : $\frac{1 - \mu^2}{\rho} \frac{\partial}{\partial \mu} \phi(\rho, \mu)$. On remarque notamment que ce terme force l'isotropie du flux au centre de la sphère.

D.2 Equations PN en sphérique

Nous allons maintenant chercher à reproduire, avec ce terme supplémentaire, la démarche qui, à partir de l'équation (C.12), nous avait amené à un système facile à résoudre.

Réintroduisons l'hypothèse PN (C.15), qui consiste à décomposer le flux sur les polynômes de Legendre. Sur ce terme on obtient :

$$\frac{1 - \mu^2}{\rho} \frac{\partial}{\partial \mu} \phi(\rho, \mu) \approx \frac{1 - \mu^2}{\rho} \sum_{l=1}^N \alpha_l \phi_l(\rho) \frac{\partial}{\partial \mu} P_l(\mu).$$

La définition des fonctions associées aux polynômes de Legendre, déjà vue plus haut (C.13) nous donne :

$$\sqrt{1 - \mu^2} \frac{\partial}{\partial \mu} P_l(\mu) = P_l^1(\mu).$$

En outre, une des relations de récurrence de ces fonctions s'écrit :

$$(2l + 1)\sqrt{1 - \mu^2} P_l^m(\mu) = (l + m - 1)(l + m) P_{l-1}^{m-1}(\mu) - (l - m + 1)(l - m + 2) P_{l+1}^{m-1}(\mu).$$

Ce qui nous donne finalement (en remarquant que $P_l^0 = P_l$) :

$$\frac{1-\mu^2}{\rho} \frac{\partial}{\partial \mu} \phi(\rho, \mu) \approx \frac{1}{\rho} \sum_{l=1}^N \alpha_l \phi_l(\rho) \frac{l(l+1)}{2l+1} (P_{l-1}(\mu) - P_{l+1}(\mu)).$$

Comme précédemment, on multiplie maintenant cette équation par $\frac{1}{2} \alpha_l P_l$ et on intègre sur μ entre -1 et 1 . On obtient :

$$\frac{1}{2\rho} \int_{-1}^1 \alpha_l P_l(\mu) \sum_{l'} \alpha_{l'} \phi_{l'} \frac{l'(l'+1)}{2l'+1} (P_{l'-1}(\mu) - P_{l'+1}(\mu)).$$

L'orthogonalité des polynômes de Legendre (C.7) nous donne finalement :

$$\frac{1}{\rho} (\phi_{l+1}(l+1)h_{l+1} - \phi_{l-1}(l-1)h_l), \quad (\text{D.2})$$

avec h_m défini comme précédemment : $h_m = \frac{m\alpha_m\alpha_{m-1}}{(2m+1)(2m-1)}$. Le terme (D.2) doit se rajouter à l'équation (C.16).

L'équation ainsi complétée peut se mettre sous forme matricielle ainsi :

$$\begin{cases} I_i \frac{\partial}{\partial t} \phi_i + T_i \phi_i + H \nabla \phi_p + \frac{1}{\rho} \bar{H} \phi_p = S_i \\ I_p \frac{\partial}{\partial t} \phi_p + \frac{1}{\rho} \bar{H}^T \phi_i + H^T \nabla \phi_i + T_p \phi_p = S_p, \end{cases} \quad (\text{D.3})$$

avec \bar{H} constitué de blocs diagonaux identiques :

$$\bar{H} = \text{diag}(\bar{H}^d, \bar{H}^d, \dots, \bar{H}^d) \text{ avec}$$

$$\bar{H}^d = \begin{bmatrix} 0 & 2h_2 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & -2h_3 & 4h_4 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & -4h_5 & 6h_6 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & -6h_7 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix} = -2(i-1)h_{2i-1}\delta_{i,j} + 2jh_{2j}\delta_{i+1,j}.$$

Les autres termes de (D.3) sont les mêmes que ceux de (C.18) à l'exception de la notation vectorielle que l'on n'a pas réintroduite ici car le problème traité est véritablement 1D.

La forme trouvée, (D.3) est susceptible de permettre une résolution PN des équations de transport sur une géométrie sphérique, en en exploitant les symétries. En revanche, les étapes suivantes du calcul qui nous ont permis de mettre les équations SPN sous la forme de diffusions couplées, à savoir diagonalisation, identification SPN/SP1 et injection de la solution du flux impair dans l'équation paire, ne semblent pas pouvoir être menées à bien avec ce terme supplémentaire.

Bibliographie

- [1] Grégoire Allaire. *Analyse numérique et optimisation*. Les éditions de l'Ecole Polytechnique, 2005.
- [2] Grégoire Allaire, Xavier Blanc, Bruno Deprés, and François Golse. *Transport et diffusion*. 2015.
- [3] Donald G. Anderson. Iterative procedures for nonlinear integral equations. *Journal of the ACM (JACM)*, 12(4) :547–560, 1965.
- [4] L. Andriolo, A. Rineiski, B. Vezzoni, F. Gabrielli, X.-N. Chen, W. Maschek, F. Delage, and E. Merle-Lucotte. An innovative methodology for evaluating core thermal expansion feedbacks in transient analyses. In *Proceedings of ICAPP 2015*, Nice, France, May 03-06 2015.
- [5] M. Arioli and J. Scott. Chebyshev acceleration of iterative refinement. *Numerical Algorithms*, pages 1–18, 2011.
- [6] M. Aufiero, C. Fiorina, A. Laureau, P. Rubiolo, and V. Valtavirta. Serpent–OpenFOAM coupling in transient mode : simulation of a Godiva prompt critical burst. In *Proceedings of M&C + SNA + MC 2015*, Nashville, USA, Apr. 19-23 2015.
- [7] Randal S. Baker, Jon A. Dahl, Erin D. Fichtl, and Jim E. Morel. Neutron transport in Eulerian coordinates with bulk material motion. In *Proceedings of M&C2013*, Sun Valley, USA, May 5-9, 2013.
- [8] Anne-Marie Baudron. Private communication.
- [9] Anne-Marie Baudron and Jean-Jacques Lautard. Simplified PN transport core calculations in the APOLLO3 system. In *Proceedings of M&C 2011*, Rio de Janeiro, Brazil, May 8-12 2011.
- [10] P. Bellier, M. Coste-Delclaux, A. Hebert, R. Sanchez, Z. Stankovski, and I. Zmijarevic. APOLLO2.5 : Notice Théorique. Technical report, CEA/DRN/DMT/SERMA/LENR 99-2719, 2002.
- [11] Pierre Benoist. *Théorie du coefficient de diffusion des neutrons dans un réseau comportant des cavités*. PhD thesis, Centre d'études nucléaires de Saclay, 1964.
- [12] Christine Bernardi. A new nonconforming approach to domain decomposition : the mortar element method. *Nonlinear Partial Differential Equations and Their Applications*, 1994.
- [13] Christine Bernardi, Yvon Maday, and Anthony T Patera. Domain decomposition by the mortar element method. In *Asymptotic and numerical methods for partial differential equations with critical parameters*, pages 269–286. Springer, 1993.

- [14] Romain Bontemps. Study of a TETAR-APOLLO3 coupling method to model an ULOF accident in ASTRID. Master's thesis, Master nuclear energy, INSTN, 2014.
- [15] Amina Bouras and Valérie Frayssé. Inexact matrix-vector products in Krylov methods for solving linear systems : a relaxation strategy. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 26(3) :660–678, 2005.
- [16] Amina Bouras, Valérie Frayssé, and Luc Giraud. A relaxation strategy for inner-outer linear solvers in domain decomposition methods. *CERFACS TR0PA000017, European Centre for Research and Advanced Training in Scientific Computation*, 2000.
- [17] C. Brezinski. *Accélération de la convergence en analyse numérique*, volume 584 of *Lecture Notes in Math.* Springer-Verlag, Berlin, 1977.
- [18] C. Brezinski. Convergence acceleration during the 20th century. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 122(1) :1–21, 2000.
- [19] Daniel Broc. Méthodes d'homogénéisation pour le comportement dynamique de faisceaux de tubes immergés dans un fluide. Technical report, DEN/DANS/DM2S/SEMT/EMSI/RT/11-010, 2011.
- [20] Daniel Broc, Jérôme Cardolaccia, Sabine Durand, David Gentet, and Jean Paul Magnaud. Physical and numerical methods for the dynamic behavior of the Fast Reactor cores. In *Proceedings of FR13*, Paris, France, Mar. 4-7 2013.
- [21] Jean Bussac and Paul Reuss. *Traité de neutronique*. Collection enseignement des sciences, 1985.
- [22] Xiao-Chuan Cai and David E. Keyes. Nonlinearly preconditioned inexact Newton algorithms. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 24(1) :183–200, 2002.
- [23] Manuel Calleja. X-tream project : Task 1a survey of the different numerical algorithms used in present computer codes. Technical report, Chalmers University of Technology. Investigation of efficient and reliable numerical algorithms for coupled reactor calculations, Göteborg, Suède, Aug. 14, 2014.
- [24] Manuel Calleja. X-tream project : Task 1b survey of the state-of-art numerical techniques for solving coupled non-linear multi-physics equations. Technical report, Chalmers University of Technology. Investigation of efficient and reliable numerical algorithms for coupled reactor calculations, Göteborg, Suède, Aug. 14, 2014.
- [25] CASL. URL : <http://www.casl.gov/>.
- [26] CAST3M. URL : <http://www-cast3m.cea.fr/>, 2015.
- [27] T. Charras and F. di Paola. *Utiliser Cast3M*, chapter La procédure PASAPAS, annexe A : Méthodes des multiplicateurs de Lagrange. CEA, 2011.
- [28] Prince Chidyagwai and Béatrice Rivière. A two-grid method for coupled free flow with porous media flow. *Advances in Water Resources*, 34(9) :1113–1123, 2011.
- [29] Mohamed Dahmani. *Résolution des équations de la cinétique des réacteurs nucléaires par la méthode nodale mixte duale en utilisant le modèle quasi-statique amélioré et implémentation dans le code CRONOS*. PhD thesis, Université Mohammed V -Agdal-, 1999.
- [30] S. Dellacherie and O. Laffite. Une solution explicite monodimensionnelle du système simplifié couplant la neutronique et la thermohydraulique. Technical report, CEA/DEN/DANS/DM2S/STMF/LMEC/NT/15-003, 2015.

- [31] Sandra Dulla, Ernest H. Mund, and Piero Ravetto. The quasi-static method revisited. *Progress in Nuclear Energy*, 50(8) :908–920, 2008.
- [32] Antonin Dussaix. Algorithm study of neutronics and thermohydraulics coupling applied to SFR. Master’s thesis, Master nuclear energy, INSTN, 2014.
- [33] V. Dykin and I. Pázsit. The role of the eigenvalue separation in reactor dynamics and neutron noise theory. In *Proceedings of PHYSOR 2014*, Kyoto, Japan, Sep. 28 - Oct. 3 2014.
- [34] M.S. Ellis, J. Watson, and K. Ivanov. Progress in the development of an implicit steady state solution in the coupled code TRACE/PARCS. *Progress in Nuclear Energy*, 66 :1–12, 2013.
- [35] Erin D. Fichtl, Randal S. Baker, Jon A. Dahl, and Jim E. Morel. A surface integral based momentum advection scheme for neutron transport in moving materials. In *Proceedings of MC2015*, Nashville, USA, Apr. 19-23, 2015.
- [36] Carlo Fiorina, Manuele Aufiero, Sandro Pelloni, and Konstantin Mikityuk. A time-dependent solver for coupled neutron-transport thermal-mechanics calculations and simulation of a GODIVA prompt-critical burst. In *Proceedings of ICON22*, Prague, Czech Republic, July 7-11 2014.
- [37] Carlo Fiorina and Konstantin Mikityuk. Application of the new GeN-Foam multi-physics solver to the European Sodium Fast Reactor and verification against available codes. In *Proceedings of ICAPP 2015*, Nice, France, May 03-06 2015.
- [38] B. Fontaine. Compte-rendu d’essai ultime n° 8, gerbage du coeur. Technical report, CEA/DEN, Service SPP, Id. PA 104 XR 103922, 2010.
- [39] Augusto Gandini. Generalized perturbation theory GPT methods. A heuristic approach. *Advances in nuclear science and technology*, 19 :205–380, 1987.
- [40] Derek Gaston, Chris Newman, Glen Hansen, and Damien Lebrun-Grandie. MOOSE : A parallel computational framework for coupled systems of nonlinear equations. *Nuclear Engineering and Design*, 239(10) :1768–1778, 2009.
- [41] P. Gauthé and G. Prulhière. Phenix : Essais fin de vie - calculs en soutien à l’essai de gerbage du coeur. Technical report, CEA/DEN/CAD/DER/SPRC/LEDC 08-424, 2008.
- [42] G. Geffraye. CATHARE 2 V2.5_2 : A single version for various applications. *Nuclear Engineering and Design*, 241(11) :4456–4463, 2011.
- [43] M. Gentili, B. Fontaine, and G. Rimpault. Deformed core reactivity evaluation with mesh projection-based method. *Nuclear Technology*, 192 :11–24, 2015.
- [44] Michele Gentili. *Aspects Neutroniques Associés à des Réseaux Irréguliers d’Assemblages dans un Coeur de RNR-Na*. PhD thesis, Université d’Aix-Marseille, 2015.
- [45] H. Golfier et al. APOLLO3 : a common project of CEA, AREVA and EDF for the development of a new deterministic multi-purpose code for core physics analysis. In *Proceedings of the International Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics*, Saratoga Springs, USA, May 03-07, 2009.
- [46] Roland Groux. Pages perso. URL : roland.groux.pagesperso-orange.fr, 2007.
- [47] Joël Guidez. *Phénix, le retour d’expérience*. edp sciences, 2013.
- [48] Michael W. Hackemack and Justin M. Pounders. Implementation of an a priori time step estimator for the multigroup neutron diffusion equation in asynchronously coupled RELAP5-3D. In *Proceedings of PHYSOR 2014*, Kyoto, Japan, Sep. - Oct. 3, 2014. Paper No. 1127681.

- [49] Jacques Hadamard. *Mémoire sur le problème d'analyse relatif à l'équilibre des plaques élastiques encastrées*, volume 33. Imprimerie nationale, 1908.
- [50] Antoine Henrot and Michel Pierre. *Variation et optimisation de formes : une analyse géométrique*, volume 48. Springer Science & Business Media, 2006.
- [51] A.F. Henry. The application of reactor kinetics to the analysis of experiments. *Nuclear Science and Engineering*, 3(1) :52–70, 1958.
- [52] A.F. Henry and N.J. Curlee. Verification of a method for treating neutron space-time problems. *Nuclear Science and Engineering*, 4(6) :727–744, 1958.
- [53] Michael Hintermüller. Semismooth Newton methods and applications. In *Oberwolfach-Seminar on "Mathematics of PDE-Constrained Optimization"*, Oberwolfach, November 2010.
- [54] Erell Jamelot and Olivier Lafitte. Différents modèles analytiques ou simplifiés pour le couplage Thermohydraulique-Neutronique. Technical report, CEA/DEN/DANS/DM2S/SERMA/LLPR/NT/15-5884, 2015.
- [55] Grzegorz Kepisty, Daniel Broc, Cyril Patricot, and Guillaume Campioni. Selected mechanical scenarios and related neutron transients in SFR model with CAST3M code. *To be submitted in Annals of Nuclear Energy*.
- [56] Grzegorz Kepisty, Guillaume Campioni, Daniel Broc, and Cyril Patricot. Toward explanation of AURN events with more reliable modeling of Phenix core scenarios. Technical report, CEA, to be published.
- [57] D.E. Keyes, L.C. McInnes, C. Woodward, W.D. Gropp, E. Myra, M. Pernice, J. Bell, J. Brown, A. Clo, J. Connors, E. Constantinescu, D. Estep, K. Evans, C. Farhat, A. Hakim, G. Hammond, G. Hansen, J. Hill, T. Isaac, X. Jiao, K. Jordan, D. Kaushik, E. Kaxiras, A. Koniges, K. Lee, A. Lott, Q. Lu, J. Magerlein, R. Maxwell, M. McCourt, M. Mehl, R. Pawlowski, A. Peters, D. Reynolds, B. Rivere, U. Rüde, T. Scheibe, J. Shadid, B. Sheehan, M. Shephard, A. Siegel, B. Smith, X. Tang, C. Wilson, and B. Wohlmuth. Multiphysics simulations : Challenges and opportunities. Technical report, ANL/MCS-TM-321, Argonne National Laboratory, Report of workshop sponsored by the Institute for Computing in Science (ICiS), Park City, Utah, USA, July 30 - Aug. 6, 2011.
- [58] Dana A. Knoll and David E. Keyes. Jacobian-free Newton-Krylov methods : a survey of approaches and applications. *Journal of Computational Physics*, 193(2) :357–397, 2004.
- [59] B.J. Knutson, D.M. Lucoff, R.A. Harris, and S.L. Hecht. Reactivity analysis of core distortion effects in the FFTF. Technical report, American Nuclear Society, 1981.
- [60] Carolina Labarta, Daniel Broc, Edouard Hourcade, and Guillaume Campioni. Modélisations et études des essais de gerbage statiques du coeur de PHENIX : Chainage mécanique-neutronique utilisant les codes APOLLO3 et TRIPOLI-4. Technical report, CEA/DEN/DANS/DM2S/SERMA/LPEC 12-5460, 2012.
- [61] Carolina Labarta Casals. Etude et modélisation pour l'interprétation des essais de gerbage statique dans le coeur du réacteur Phénix. Master's thesis, Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Industrial de Barcelona, 2012.
- [62] Olivier Lafitte. Couplage d'une approximation de la mécanique des fluides avec le comportement élastique des solides poreux. Technical report, CEA/DEN/DANS/DM2S/DIR/NT/15-001, 2015.
- [63] Edward W. Larsen and G.C. Pomraning. Boundary perturbation theory. *Nuclear science and engineering*, 77 :415–425, 1981.

- [64] E.W. Larsen, J.E. Morel, and J.M. McGhee. Asymptotic derivation of the simplified PN equations. In *Proceedings of M&C + SNA 93*, Karlsruhe, Germany, Apr. 19-23 1993.
- [65] J.J. Lautard, S. Loubiere, and C. Fedon-Magnaud. CRONOS a modular computational system for neutronic core calculations. In *Specialists Meeting on Advanced Computational Methods for Power Reactors*, Cadarache, France, 1990.
- [66] G. Le Guillou, J.-C. Colonges, and J. Pont. Le bruit neutronique sur les reacteurs a neutrons rapides francais : Bilan et perspectives apres dix annees d'experience sur le reacteur phenix. *Progress in Nuclear Energy*, 15 :491–500, 1985.
- [67] Patrick Le Tallec. *Modélisation et calcul des milieux continus*. Les éditions de l'école polytechnique, 2009.
- [68] R. Le Tellier, C. Suteau, D. Fournier, and J.-M. Ruggieri. High-order discrete ordinate transport in hexagonal geometry : a new capability in ERANOS. *Il Nuovo cimento della Società italiana di fisica*, 33C :121–128, 2010.
- [69] Sylvain Ledru. Etude neutronique des arrêts d'urgence par réactivité négative du réacteur Phénix. Master's thesis, Ecole Polytechnique, 2009.
- [70] J. Leppänen. Development of a dynamic simulation mode in Serpent 2 Monte Carlo code. In *Proceedings of M&C 2013*, Sun Valley, USA, May 5-9 2013.
- [71] Pierre-Louis Lions. *Modélisation mathématique*. Ecole Polytechnique, 2003.
- [72] Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives. *La neutronique*. Une monographie de la direction de l'énergie nucléaire, 2013.
- [73] Loris Longo Mucciante. Simulation de transitoires neutroniques de dilatations/compactions dans les RNR-Na. Scénario AU-RN (Arrêts d'Urgence par Réactivité Négative). Master's thesis, ENSTA ParisTech, 2010.
- [74] C. Magnaud, F. Moreau, I. Befeno, and P.I. Diouf. CRONOS2.12 : Manuel de référence. Technical report, CEA/DEN/DANS/DM2S/SERMA/LLPR 13-5569, 2013.
- [75] Vincent A. Mousseau. Implicitly balanced solution of the two-phase flow equations coupled to nonlinear heat conduction. *Journal of computational physics*, 200(1) :104–132, 2004.
- [76] Vincent A. Mousseau. A fully implicit hybrid solution method for a two-phase thermal-hydraulic model. *Journal of heat transfer*, 127(5) :531–539, 2005.
- [77] Vincent A. Mousseau. A fully implicit, second order in time, simulation of a nuclear reactor core. In *Proceedings of ICONE 14th International Conference on Nuclear Engineering*, pages 383–392, Miami, USA, 2006. American Society of Mechanical Engineers.
- [78] A.G. Mylonakis, M. Varvayanni, N. Catsaros, P. Savva, and D.G.E. Grigoriadis. Multi-physics and multi-scale methods used in nuclear reactor analysis. *Annals of Nuclear Energy*, 72 :104–119, 2014.
- [79] NURES SAFE. URL : <http://www.nuresafe.eu/>.
- [80] OpenFOAM. URL : <http://www.openfoam.com/>, 2015.
- [81] K.O. Ott and D.A. Meneley. Accuracy of the quasistatic treatment of spatial reactor kinetics. *Nuclear Science and Engineering*, 36(3) :402–411, 1969.
- [82] Cyril Patricot. Revue des techniques de couplage séquentielles usuelles. Technical report, CEA/DEN/DANS/DM2S/SERMA/LPEC/NT/15-5799, 2015.

- [83] Cyril Patricot, Daniel Broc, Edouard Hourcade, and Karim Ammar. APOLLO3 based method for 3D wrapped cores calculations - Application to flowering tests of Phénix. In *Proceedings of PHYSOR 2014*, Kyoto, Japan, Sep. 28 - Oct. 03 2014.
- [84] Cyril Patricot, Olivier Fandeur, and Anne-Marie Baudron. Interests of the improved quasi-static method for multi-physics calculations illustrated on a neutronics-thermomechanics coupling. In *Proceedings of PHYSOR 2016*, Sun Valley, USA, May 01-05 2016.
- [85] Cyril Patricot, Olivier Fandeur, Anne-Marie Baudron, and Daniel Broc. Neutronic calculation of deformed cores : Development of a time-dependent diffusion solver in CAST3M, a mechanics dedicated finite elements code. In *Proceedings of PHYSOR 2016*, Sun Valley, USA, May 01-05 2016.
- [86] Cyril Patricot, Grzegorz Kepisty, Karim Ammar, Guillaume Campioni, and Edouard Hourcade. Thermal-hydraulics/Thermal-mechanics temporal coupling for unprotected loss of flow accidents simulations on a SFR. In *Proceedings of ICAPP 2015*, Nice, France, May 03-06 2015.
- [87] Jacques Pellet et al. *Manuel de référence du Code_Aster, fascicule r3.03 : Conditions aux limites et chargements*, chapter Dualisation des conditions aux limites. EDF R&D, 2011.
- [88] Y. Penelieu. Calcul d'activation des structures et des protections dans le réacteur PHÉNIX en vue de son démantèlement sans prise en compte du stockage interne. Technical report, CEA/DEN/CAD/DER/SPRC/LEDC 07-426, 2008.
- [89] Jacques Planchard. *Méthodes mathématiques en neutronique*. Collection de la Direction des Etudes et Recherches d'Electricité de France, 1995.
- [90] Salome Platform. URL : www.salome-platform.org/user-section/documentation/current-release, 2013.
- [91] G.C. Pomraning. Asymptotic and variational derivations of the simplified PN equations. *Annals of nuclear energy*, 20(9) :623–637, 1993.
- [92] Michael P. Pope and Vincent A. Mousseau. Accuracy and efficiency of a coupled neutronics and thermal hydraulics model. In *Proceedings of 12th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-12)*, Pittsburgh, USA, 2007.
- [93] Justin M. Pounders and Joseph Boffie. Analysis of an adaptative time step scheme for the transient diffusion equation. In *Proceedings of MC2015*, Nashville, USA, Apr. 19-23, 2015.
- [94] Géraud Prulhiere. Interprétation neutronique de l'essai de gerbage du coeur de PHÉNIX. Technical report, CEA/DEN/CAD/DER/SPRC/LEDC/ 10-402, 2010.
- [95] I. Pázsit. The linearization of vibration-induced noise. *Annals of Nuclear Energy*, 11 :441–454, 1984.
- [96] I. Pázsit and C. Demazière. *Noise Techniques in Nuclear Systems*, volume 3, chapter 2. Dan gabriel cacuci edition, 2010.
- [97] Alfio Quarteroni and Alberto Valli. *Domain decomposition methods for partial differential equations*. Oxford University Press, 1999.
- [98] Jean C. Ragusa and Vijay S. Mahadevan. Consistent and accurate schemes for coupled neutronics thermal-hydraulics reactor analysis. *Nuclear Engineering and Design*, 239(3) :566–579, 2009.

- [99] F. Rahnema and G.C. Pomraning. An anomaly in the use of the perturbation theory. *Nuclear science and engineering*, 78 :393–437, 1981.
- [100] F. Rahnema and G.C. Pomraning. Boundary perturbation theory for inhomogeneous transport equations. *Nuclear Science and engineering*, 84(4) :313–319, 1983.
- [101] F. Rahnema and G.C. Pomraning. External boundary perturbations in neutron transport theory. *Journal of Mathematical Physics*, 24(3) :687–701, 1983.
- [102] Mark Reed, Kord Smith, and Benoit Forget. The "virtual density" theory of neutronics : a generic method for geometry distortion reactivity coefficients. In *Proceedings of PHYSOR 2014*, Kyoto, Japan, Sep. 28 - Oct. 3 2014.
- [103] Paul Reuss. *Précis de neutronique*. EDP Sciences, 2003.
- [104] G. Rimpault, D. Plisson, J. Tommasi, R. Jacqmin, J.M. Rieunier, D. Verrier, and D. Biron. The ERANOS code and data system for fast reactor neutronic analyses. In *Proceedings of PHYSOR 2002*, Seoul, Korea, Oct. 7-10 2002.
- [105] Amélie Rouchon. *Analysis and development of deterministic and stochastic neutron noise computing techniques with applications to thermal and fast reactors*. PhD thesis, CEA, 2016.
- [106] Amélie Rouchon and Richard Sanchez. Analysis of vibration-induced neutron noise using one-dimension noise diffusion theory. In *Proceedings of ICAPP 2015*, Nice, France, May 03-06 2015.
- [107] Richard Sanchez, Igor Zmijarevic, Mireille Coste-Delclaux, Emiliano Masiello, Simone Santandrea, Emanuele Martinolli, Nadine Schwartz, and Nathalie Guler. APOLLO2 year 2010. *Nuclear Engineering and Technology*, 42(5) :474–499, 2010.
- [108] A. Santamarina, D. Bernard, P. Blaise, M. Coste, A. Courcelle, T.D. Huynh, C. Jouanne, P. Leconte, O. Litaize, S. Mengelle, G. Noguère, J-M. Ruggiéri, O. Sérot, J. Tommasi, C. Vaglio, and J-F. Vidal. The JEFF-3.1.1 Nuclear Data Library : validation results from JEFF-2.2 to JEFF-3.1.1. Technical report, OECD/NEA No 6807, JEFF report 22, 2009.
- [109] A. Sargeni, K.W. Burn, and G.B. Bruna. Coupling effects in large reactor cores : The impact of heavy and conventional reflectors on power distribution perturbations. In *Proceedings of PHYSOR 2014*, Kyoto, Japan, Sep. 28 - Oct. 03 2014.
- [110] Damien Schmitt, Grégoire Allaire, Olivier Pantz, and Nicolas Pozin. Shape optimization of a sodium cooled fast reactor. In *Proceedings of SNA + MC 2013*. EDP Sciences, 2014. article number 02206.
- [111] P. Sciora, L. Buiron, D. Gibiat, J.C. Klein, D. Plisson-Rieunier, S. Pomerouly, M.S. Chenaud, and S. Massara. Interface ERANOS/CATHARE : Description des méthodes et des données de calcul des contre-réactions. Technical report, CEA/DEN/CAD/DER/S-PRC/LEDC 09-406, 2009.
- [112] S.B. Shikhov. The effect of dimensional changes on the critical mass of a fast reactor, calculated by perturbation theory. *Journal of Nuclear Energy*, 11 :214–219, 1960. Translated from *Atomnaya Energiya* 6, p.162-168 (1959).
- [113] Gilbert Strang. On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 5(3) :506–517, 1968.
- [114] H.G. Sutton and J.A. Rylatt. Design of the core support and restraint structures for FFTF and CRBRP. Technical report, Westinghouse Handford company, 1977.

- [115] D.J. Swaim, J.B. Waldo, and O.A. Farabee. Ten years operating experience at the fast flux test facility : a decade of excellence. Technical report, Westinghouse Handford company, 1991.
- [116] Alexandre Targa, Jean-Charles Le Pallec, and Patrick Le Tallec. Multiscale and multi-solver pin power reconstruction approach in a reactor core calculation. In *Proceedings of ICAPP 2015*, Nice, France, May 03-06 2015.
- [117] Y. Tigeot and G. Le Guillou. Neutron noise induced by vibration on the french PHENIX LMFBFR. *Progress in Nuclear Energy*, 1(2) :487–496, 1977.
- [118] Yves Tigeot. Mémorandum concernant les AURN du réacteur PHENIX. Technical report, CEA, 2009.
- [119] Yves Tigeot. AU/RN PHENIX "Scénario mécanique envisageable". Technical report, CEA, 2012.
- [120] Andrea Toselli and Olof Widlund. *Domain decomposition methods - algorithms and theory*. Springer, 2005.
- [121] A. Toth, C.T. Kelley, S. Slattery, S. Hamilton, K. Clarno, and R. Pawlowski. Analysis of Anderson acceleration on a simplified neutronics/thermal hydraulics system. In *Proceedings of MC2015*, Nashville, USA, Apr. 19-23, 2015.
- [122] TRIPOLI-4. Monte Carlo transport code. URL : <http://www.nea.fr/abs/html/nea-1716.html>, 2013.
- [123] H.A. Van der Vorst. BI-CGSTAB : A fast and smoothly converging variant of BI-CG for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on scientific and Statistical Computing*, 13(2) :631–644, 1992.
- [124] A. Vidal-Ferrandiz, R. Favez, G. Verdu, and D. Ginestar. Solving the time-dependent neutron diffusion equation using moving meshes. In *Proceedings of MC2015*, Nashville, USA, Apr. 19-23, 2015.
- [125] Homer F. Walker and Peng Ni. Anderson acceleration for fixed-point iterations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 49(4) :1715–1735, 2011.
- [126] Justin Kyle Watson. *Implicit time-integration method for simultaneous solution of a coupled non-linear system*. PhD thesis, The Pennsylvania State University, 2010.
- [127] A.M. Weinberg and H.C. Schweinler. Theory of oscillating absorber in a chain reactor. *Physical Review*, 74(8) :851–863, 1948.
- [128] B.R. Wienke. Transport equation in modified Eulerian coordinates. *Physics of Fluids*, 17(6) :1135–1138, 1974.
- [129] B.R. Wienke. Transport equations in moving material Part I : Neutrons and photons. *Progress in Nuclear Energy*, 46(1) :13–55, 2005.
- [130] B.R. Wienke and T.R. Hill. Effective cross sections and sources in moving material. *Nuclear Science and Engineering*, 104(2) :188–196, 1990.
- [131] B.R. Wienke, T.R. Hill, and P.P. Whalen. Eulerian and Lagrangian particle transport with drag. *Computer physics communications*, 43(2) :171–180, 1987.
- [132] B.R. Wienke, T.R. Hill, and P.P. Whalen. Multigroup particle transport in a moving material. *Journal of Computational Physics*, 72(1) :177–201, 1987.
- [133] T.F. Wimett. Time behavior of Godiva through prompt critical. Technical report, Los Alamos scientific laboratory, 1956.

- [134] Hsingtzu Wu and Rizwan-uddin. A tightly coupled scheme for neutronics and thermal-hydraulics using open-source software. *Annals of Nuclear Energy*, 87 :16–22, 2016.
- [135] Akira Yamaguchi, Hajime Niwa, Mitsuaki Yamaoka, Kazuyuki Tsukimori, Yoshio Shimakawa, Hisashi Ninokata, and Kiyoto Aizawa. Comprehensive analysis of passive safety test phase IIB in the fast flux test facility. *Nuclear technology*, 107(1) :23–37, 1994.
- [136] H. Yamano, S. Fujita, and Y. Tobita. SIMMER-III : A computer program for LMFR core disruptive accident analysis. Version 3. A model summary and program description. Technical report, Japan Nuclear Cycle Development Inst., 2003.
- [137] Andrew Yeckel, Lisa Lun, and Jeffrey J Derby. An approximate block Newton method for coupled iterations of nonlinear solvers : Theory and conjugate heat transfer applications. *Journal of Computational Physics*, 228(23) :8566–8588, 2009.
- [138] Omar Zerkak, Annalisa Manera, Ivan Gajev, and Tomasz Kozlowski. Review of multi-physics coupling techniques and suggestions of improvements in the context of NURISP. Technical report, NURISP, 2009.
- [139] Florian Zylbersztejn. *Developments and application of neutron noise diagnostics of sodium cooled fast reactors*. PhD thesis, CEA / Chalmers University of Technology, 2013.

Titre : Couplages multiphysiques : évaluation des impacts méthodologiques lors de simulations de couplages neutronique / thermique / mécanique

Mots clés : Couplages multiphysiques, neutronique, mécanique, cœurs déformés, Phénix

Résumé : L'objectif de cette thèse est l'étude des méthodes de couplage entre neutronique, thermique et mécanique. Après une revue générale des techniques de couplage, on s'est intéressé à la prise en compte de déformations mécaniques dans les simulations neutroniques. Les codes actuels de neutronique utilisant des méthodes déterministes ne sont généralement pas capables de traiter une géométrie déformée. Ce type de calcul a pourtant un intérêt fort pour la filière rapide et est un prérequis indispensable pour l'étude du couplage envisagée.

Deux approches ont été identifiées et implémentées pour répondre à cette problématique, selon que l'on utilise un maillage de calcul mobile ou fixe. Elles ont été testées et confrontées sur les essais de gerbage du réacteur Phénix. Le couplage a été étudié ensuite, avec l'approche à maillage mobile, sur l'expérience Godiva qui présente

un couplage à la fois conceptuellement simple et fort entre les physiques qui nous intéressent. Ces travaux ont permis de mettre en avant l'utilisation de la méthode de factorisation quasi-statique en neutronique qui permet de coupler efficacement un solveur de neutronique cinétique avec une autre discipline. Travail plus amont, le développement d'un solveur directement multiphysique a également été exploré. L'utilisation de l'algorithme de Newton sur les formes discrétisées des équations couplées a donné de bons résultats et semble être une approche généralisable à d'autres couplages.

Cette thèse débouche ainsi à la fois sur une meilleure compréhension de la physique des cœurs déformés et sur des outils opérationnels pour leur simulation, mais aussi sur des recommandations très générales pour la mise en œuvre de calculs couplés.

Title : Multiphysics couplings : methodology impact evaluation for neutron transport / heat transfer / mechanics coupling simulations.

Keywords : Multiphysics couplings, neutron transport, mechanics, deformed cores, Phénix

Abstract : The objective of this thesis is to study coupling techniques between neutron transport, heat transfer and mechanics. First, a very general review of coupling techniques in the literature was done. Then we worked on neutron transport simulations in wrapped cores. Most of current deterministic codes for neutron transport are not able to deal with deformed geometry. This kind of computations is however of special interest for fast neutrons reactors and is a prerequisite for our planned coupling study.

Two approaches were identified and implemented to take into account core deformations, using respectively mobile and fixed meshing. They were tested and compared on the flowering tests of the reactor Phenix. The coupling itself was studied afterwards, on the Godiva experiment. It was chosen

because of the direct, strong and time-dependent coupling it involves. On this case, the "quasi-static" factorization of neutron flux was shown to be an effective way to couple a space- and time-dependent neutron transport solver with another discipline. We also investigated the development of a unique multiphysics solver. The well-known Newton algorithm applied to the discretized forms of the coupled equations was shown to be an efficient tool, which could be generalized to other couplings.

This thesis therefore leads, on the one hand, to a better understanding of the physics of deformed cores and to operational tools to simulate these effects, and on the other hand, to very general advices for multiphysics calculations.